LIVRO DE RESUMOS

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

VIII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos
24 a 28 de setembro de 2018

São Carlos
Instituto de Física de São Carlos
2018

Universidade de São Paulo

Reitor: Prof. Dr. Vahan Agopyan
Vice-Reitor: Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandes

Instituto de Física de São Carlos

Diretor: Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato
Vice-Diretor: Prof. Dr. Igor Polikarpov

Normalização e revisão - SBI/IFSC

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

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(8: 24 set. – 28 set.: 2018: São Carlos, SP.).
Livro de resumos da VIII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Humberto Ribeiro de Souza [et al].São Carlos: IFSC, 2018
390p.

Texto em português.

1.Fisica. I. Souza, Humberto Ribeiro de C.II. Titulo.

ISBN : 978-85-61958-23-7 CDD 530

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 8

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato
Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho
Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa
Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Amanda Araujo Silva
Artur Venturelli Domingues
Beatriz Saiani Bellini
Gabriel dos Santos Araujo Pinto
Gabriela Ruiz
Humberto Ribeiro de Souza
João Hiroyuki de Melo Inagaki
José Augusto dos Santos
Juliana Naomi Yamauti Costa
Murilo Franchi
Natane Isabel de Souza Neves
Nayla Naomi Kusimoto Takeuti
Paulina Rossi Ferreira
Raquel González Sterman
Roberto Hiroshi Matos Furuta
Vicente Mattos
Vitoria Baldan

Carta de apresentação

Já em sua oitava 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, palestras de empresas, 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 22ª edição, incluído no evento em 2011. Além de apresentações da Pós-Graduação, alunos de iniciação científica poderão apresentar seus trabalhos, sendo que a etapa local do XXVI Simpósio Internacional de Iniciação Científica e Tecnológica da USP ocorre conjuntamente ao Workshop. Durante o Workshop, todos os estudantes são avaliados por professores e pós-doutorandos da área, a fim de acompanhar a evolução em seu projeto. O Workshop é de extrema importância na avaliação da CAPES, em que o instituto mantém nível de excelência por diversos anos.

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

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

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 8

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Ferramenta de visualização de sistemas caóticos visando a procura de pseudo-aleatoriedadepseudo-aleatoriedade
ALVARENGA, J. P. V. ; BRUNO, O. M. 31

IC2 - Encapsulamento de doxorrubicina em PLGA para controle do perfil de liberação.
ANTONIO, L. C. ; RIBOVSKI, L. ; ZUCOLOTTO, V. 32

IC3 - Aplicação da RMN para o estudo de rochas reservatório de petróleo.
ASNIS, Y. P. ; MONTRAZI, E. T. ; PEZZATTI, R. R. ; BONAGAMBA, T. J. 33

IC4 - Non-degenerate k.p method applied to D3d symmetry crystalline structures
BALTHAZAR, A. L. 34

IC5 - Microfabricação em GaN com pulsos de femtossegundos
BARBOSA, G.R. ; ALMEIda, G. F. B. ; MENdoNÇA, C. R. 35

IC6 - Expressão e purificação do complexo constituído pelas proteínas não estruturais NS2B e NS3 protease do vírus da Zika
BERTOLINE, L. M. F. ; OLIVEIRA, K. Z. ; OLIVA, G. ; MESQUITA, N. C. M. R. 36

IC7 - Simulação estocástica de metabolismos
BORSATO, V. E. K. ; FONTANARI, J. F. 37

IC8 - Desenho e caracterização de novas formas solidas cristalinas de antidepressivos
CECILIO, N. G. ; ELLENA, J. A. 38

IC9 - Avaliação do metabolismo do ferro de células expostas à nanopartículas de óxido de ferro
CHAVES, B. F. ; CANCINO, J. 39

IC10 - Estudo da toxicidade de nanopartículas de CuO e do sal CuSO4 para Daphnia magna
CHIQUITO, J. G. G. ; SILVA, B. P. C. ; MANSANO, A. S. 40

IC11 - Influência da estrutura de comunidades nas caminhadas aleatórias em redes complexas
CONTI, F. A. 41

IC12 - Arquitetura de cristais em vidros
CORRADINE, I. G. 42

IC13 - Estudos de estabilidade e condicionamento estrutural de telescópios de luz [Pleaseinsertintopreamble]erenkov
COSTA, L. L. ; SPENGLER, G. ; SCHWANKE, U. 43

IC14 - Uso combinado de RMN de estado sólido em alto e baixo campo magnético para caracterização de mobilidade molecular de sistemas orgânicos
COSTA, R G L 44

IC15 - Estudo da combinação de fotobiomodulação e terapia fotodinâmica em células de carcinoma espinocelular oral
COSTA, C. S. ; FARIA, C. M. G. ; BAGNATO, V. S. 46

IC16 - Efeito Josephson em condensados de Bose-Einstein
DONATO, M.H. F.; MUNIZ, S. R. 47

IC17 - Avaliação de compostos em patógenos bacterianos multirresistentes como parte do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos- CIBFar
DORNELAS, J. V. ; CAMARGO, I. L. B. C. 48

IC18 - Geração e deposição controlada de nanopartículas metálicas usando a técnica de transferência induzida a laser
FERREIRA, P. R. ; ALMEIda, J. M. P. ; MENdoNÇA, C. R. 50

IC19 - A sabedoria das massas: modelando o efeito da imitação de indivíduos bem-sucedidos
FERREIRA, T. ; FONTANARI, J. F. 51

IC20 - Identificação de amebas de vida livre no Rio Monjolinho em São Carlos - SP
FONSECA, A. L. M. ; BELLINI, N. K. ; THIEMANN, O. H. 53

IC21 - Linear and non-linear optical spectroscopic studies in perylene
GALINdo, D. D. M.; de BONI, L. 54

IC22 - Avaliação morfo-histológica de larvas do Aedes aegypti submetidas a inativação fotodinâmica
GARBUIO, M. ; SOUZA, L. M. ; VENTURINI, F. P. ; INAda, N. M. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C. 55

IC23 - Montagem de uma linha experimental de Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser (LIBS) com pulsos de femtossegundos
GARCIA, R. Q. ; de BONI, L. 56

IC24 - Estudos estruturais e funcionais da enzima NS5 RNA-dependente RNA polimerase do virus da febre amarela
GAWRILJUK, V. F. O. 57

IC25 - Construção de uma plataforma de sensores resistivos para ser utilizada na detecção de gases tóxicos
GOdoY, R. S. F. ; CARASCHI, L. C.; MASTELARO, V. R. 58

IC26 - Investigação de algoritmos de aprendizagem de máquina aplicados ao desenho de potenciais ópticos
RAMPIM JUNIOR, A. ; MUNIZ, S. R. 59

IC27 - Direct Cherenkov light simulation
KARASAWA, E. G. ; SOUZA , V. de ; 60

IC28 - Busca indireta por matéria escura no centro galático com o Cherenkov Telescope Array
KHERLAKIAN, M. C. ; SOUZA, V. 61

IC29 - Implementação de um teste de aleatoriedade para avaliar um algoritmo de criptografica baseado em caos
LARSEN, B. P. ; JUSTO, M. J. M. 62

IC30 - Avaliação da citotoxicidade, genotoxicidade e mutagenicidade das nanopartículas de prata em Vicia faba
LIMA, T. H. N. ; PEREIRA, V. A.; CAIRES, A. R. L. 63

IC31 - Human and nature dynamics (HANDY) model and Asabiyya
LOPES, G. M. ; FONTANARI, J. F. 64

IC32 - Estimulação transcranial a laser em paciente com Acidente Vascular Encefálico (AVE)
LUCCAS, G. A. A. ; PAOLILLO, F. R. ; CASTRO NETO, J. C. 65

IC33 - Estudos estruturais e funcionais da proteína NSP2 protease de Chikungunya
MACEdo, B. M. 66

IC34 - Natureza topológica de instantons no espaço-tempo euclidiano
MALAVAZZI, H. 67

IC35 - Projeto e fabricação de uma lente metamaterial para aprimoramento da captação de energia de ondas eletromagnética em sensores autônomos
MAREGA, G. M. ; PEPINO, V. M. ; BORGES, B-H. V. 68

IC36 - Biossensores amperométricos grafite/poliuretano modificado com quitosana para a detecção de bisfenol A
MARION, S. C. F. ; CERVINI, P. ; GONÇALVES, D. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 69

IC37 - Microscopia Raman confocal na análise da resposta de tumores 3D após a terapia fotodinâmica.
MARQUES, M. J. A. M. ; IERMAK, I. ; CAMPOS, C. P. ; INAda, N. M. 70

IC38 - Rotação não linear da polarização elítpica: refração e absorção de dois fótons
MELHADO, M. S. ; MISOGUTI, L. 71

IC39 - Thermodynamic properties of a harmonically trapped, ultracold Bose gas
MIOTTI, M. P. ; FRITSCH, A. R. (1, 2); HEMMERLING, M. ; BAGNATO, V. S. 72

IC40 - Preparação de células fotovoltaicas orgânicas usando solventes verdes
MIRANda, G. S. ; TORRES, B. B. M. ; BALOGH, D. T. ; FARIA, R. M. 73

IC41 - Terapia fotodinâmica por excitação de dois fótons em células de melanoma
NAKAda, P. J. T. 74

IC42 - Development of genosensor for plant-parasitic nematode detection
NASCIMENTO, I. S. ; ZUCOLOTTO, V. 75

IC43 - Um modelo estocástico de crescimento populacional com limitação de recursos
NEVES, L. R. T. 76

IC44 - A sabedoria das massas: o efeito da distribuição das estimativas individuais
NOBRE, D. A. ; FONTANARI, J. F. 77

IC45 - Determinação da energia de limiar para fabricação com pulsos de femtossegundos
NOLASCO, L. K. ; MENdoNÇA, C. R. ; ALMEIda, G. F. B. 78

IC46 - Estudos estruturais e funcionais do complexo NS2B-NS3 protease do vírus da febre amarela
NOSKE, G. D. ; GOdoY, A. S. ; OLIVA, G. 79

IC47 - Fontes locais de raios cósmicos ultra-energéticos
OLIVEIRA, C. 81

IC48 - Uso de visão computacional para reconhecimento de rachaduras
KÜHL, K. F. 82

IC49 - Desenvolvimento de imunossensores flexíveis para a detecção de cortisol salivar
GABRIEL-PEREIRA, F. ; RAYMUNdo-PEREIRA, P. A. ; OLIVEIRA J., O. N. 83

IC50 - Aplicação da fluorescência da clorofila para determinar as alterações no status fisiológico da Vicia faba induzido por nanopartículas de prata
PEREIRA, V. A. ; CAIRES, A. R. L. 84

IC51 - Desenvolvimento e desenvolvimento de um simulador para imagens e espectroscopia por ressonância magnética
PESSOA, V. H. M. ; PIZETTA, D. C.; PAIVA, F. F. 85

IC52 - Studies of SEPT2-SEPT6 heterocomplex: revealing the molecular determinants involved in the interaction
ROSA, H. V. D. ; LEONARdo, D. A ; GARRAT, R. C. ; ARAÚJO, A. P. U. 86

IC53 - Análise estrutural de mutações do receptor de andrógeno humano: cálculos de energia livre e correlação com achados clínicos
TANIMOTO, C. ; NASCIMENTO, A. S. 87

IC54 - Desenho de novas formas multicomponentes solidas de insumos farmaceuticos ativos antidepressivos.
SILVA, A. P. O. da ; ELLENA, J. A. 89

IC55 - Electro-crystallization of TiO2 nanotubes applied for H2 solar generation
SANTOS, L. F. L. S. 90

IC56 - Determinação de diagramas de bandas de energia de semicondutores por espectroscopia de raios X
SANTOS, L. F. S. E. 91

IC57 - Estudos estruturais e funcionais de xilanases com potencial aplicação biotecnológica.
SEPULCHRO, A. G. V. ; POLIKARPOV, I. 92

IC58 - Análises fenotípicas da linhagem Staphylococcus aureus SA43 após evolução dirigida com linezolida ou tedizolida
SILVA, G. V. (1,2); daBUL, A. N. G. ; CAMARGO, I. L. B. C. 93

IC59 - Caracterização de novos moduladores de microtúbulos com propriedades anticâncer
SILVA, E. M. G. ; MARTINS, C. T. ; MAGALHAES, L. G. ; RUSSOWSKY, D. ; ANDRICOPULO, A. D. 94

IC60 - Pinças opticas para nanopartículas: explorando teoria, experimento e simulações numéricas.
SILVA, P. F. ; MUNIZ, S. R. ; MARTINS, T. T. 96

IC61 - O Dêuteron e a escala de massa do modelo padrão
SILVA, A. H. 97

IC62 - Otimização dos parâmetros da transformada inversa de Laplace para aplicações em ressonância magnética de meios porosos
SOLCIA, G. ; MONTRAZI, E. T. ; PAIVA, F. F. 98

IC63 - Um estudo sobre a termodinâmica de temperatura negativa
SOUSA, G. 99

IC64 - Topologias e dinâmicas neuronais
SOUZA, P. J. P. 100

IC65 - Desenvolvimento de padrões de referencia para sistemas ópticos em biofotônica.
SOUZA, G. de ; ROMANO, R. A. ; MORIYAMA, L. T. ; KURACHI, C. 101

IC66 - Incorporação de Sr em vidros fosfatos de Ca
TSUNAKI, L. B. E. 103

IC67 - A causal approach to recover networks fromdata
MARTINELLI, T. 104

IC68 - Descrição teórica de neutrinos de altas energias
TIBURCIO, B. H. C. 105

IC69 - Potencial de aprisionamento tipo caixa para átomos frios
TORTORELLI, G. P. ; HENN, E. A. L. 106

IC70 - Caracterização óptica da permeabilidade da membrana de candida albicans para fotossensibilizadores
VICENTE, M. L. F. ; NIRO, C. M. 107

IC71 - Descoberta de novos compostos Híbridos de Artesunato e Artemisininacomo novos candidatos para o desenvolvimento de antimaláricos
ZANINI, C. L.(1); SANTOS, C. R. D. ; AGUIAR, A. C. C. 108

IC72 - Estudo de técnica de vídeo-ceratometria e desenvolvimento de protótipo de baixo custo para biometria ocular
LAISSENER, B. S. ; OLIVEIRA, A. O. ; CASTRO NETO, J. C. 109

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - "Rogue waves" via ruído do vácuo
AFONSO, R. J. S. ; MOUSSA, M. H. Y. 110

PG2 - Simulação via método de Monte Carlo dos efeitos microfísicos de colisão de prótons de radiações cósmicas com DNA, em ambiental espacial e planetário
AGUERA, J. J. M.; GALANTE, D. ; MARINHO, F. 111

PG3 - Estudo estrutural e funcional de hidrolases de glicosídeos celulossomais termofílicas envolvidas no processo de hidrólise de biomassa lignocelulósica
ALMEIda, L. R. ; SILVA, W. G. ; MUNIZ, J. R. C. 113

PG4 - Estudo do recobrimento biológico de nanossuperfícies por modelagem computacional: aplicação no desenvolvimento de imunonanossensores
AMARANTE, A. M. ; IERICH, J. C. M. ; GARCIA, P. S. ; MORAES, A. S. ; SOUZA, D. G. B. ; FRANCA, E. F. ; FREITAS, L. C. G. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; LEITE, F. L. 115

PG5 - Supercondutores holográficos
APRILE, N. P. ; HARTMANN, B. 116

PG6 - Physarum polycephalum: um modelo biológico de inteligência coletiva
AQUINO, L. F. ; FONTANARI, J. F. 117

PG7 - Stochastic analysis of minimal models of negative feedback genetic networks
ARAUJO, G. D. ; MAIA, L. P. 118

PG8 - Propriedades eletrônicas e supercondutividade em quasicristais.
ARAUJO, R. N. ; ANDRAde, E. C. 119

PG9 - Exploring structure-function relationships of glycoside hydrolases from families 9, 48 and 74
ARAÚJO, E. A. ; POLIKARPOV, I. 120

PG10 - On the parametrization of depth of maximum of ultra-high energy extensive air showers
ARBELETCHE, L. B. ; SOUZA, V. D. 122

PG11 - Purificação e caracterizaçãode biossurfactante produzidopor linhagem termofílica de Bacillus isolada de amostra rochosa de reservatório de petróleo
ARGENTIN, M. N. ; BOSSOLAN, N. R. S. 124

PG12 - Desenvolvimento de um método de observação contínua de oscilações de Bloch de átomos ultrafrios
MORENO,M. ; KESSLER, H. ; COURTEILLE, P.. W. 126

PG13 - An unified treatment for shock waves and immersed bodies in fluids
AURICHIO, V. H. ; CUCCHIERI, A. ; OLIVEIRA, M. L. B. de 128

PG14 - Mudanças na energia livre associada ao movimento de domínios na UDP-N-Acetilglicosamina 2- epimerase de S. aureus
AZEVEdo, E.C. ; NASCIMENTO, A.S. 129

PG15 - A phenomenological study of the boron-to-carbon ratio in the diffusive propagation of cosmic rays in the galaxy
BATISTA, P. I. S. ; VECCHI, M. 130

PG16 - Propriedades termodinâmicas de horizontes causais
BARBOSA, M. G. ; VANZELLA, D. A. T. 132

PG17 - Estimação de parâmetros em sistemas quânticos
BARRETO, D. L. ; SOARES-PINTO, D. O. 133

PG18 - Ab-initio investigation of structural stability and exfoliation energies in transition metal dichalcogenides based on Ti-, V-, and Mo-group elements
BASTOS, C. M. O. B. ; BESSE, R. ; SILVA, J. L. F. da ; SIPAHI, G. M. 134

PG19 - Free living amoeba diversity on Monjolinho river at state of São Paulo and Naegleria gruberi as a model to selenocysteine (SEC) pathway study
BELLINI, N. K. ; FONSECA, A. L. M. ; THIEMANN, O. H. 135

PG20 - Exploration of two-dimensional late transition metal dichalcogenides with density functional theory
BESSE, R. 137

PG21 - Estudos das propriedades de vórtices em Condensados de Bose-Einstein com interação dipolar
BIRAL, E. J. P.. ; SANTOS, F. E. A. . S. 139

PG22 - Complex networks in medical image analysis: osteoarthritis application
BRAZ, D. C. ; BRUNO, O. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 140

PG23 - Novas plataformas para o diagnóstico rápido e precoce do Mal de Alzheimer
BRAZACA, L. C. 141

PG24 - Estudos de relações entre estrutura e função de xilose isomerase
BRIGANTI, L. D. B. ; POLIKARPOV, I. 143

PG25 - Influência da mutação T282Y na termoestabilidade do heterodímero SEPT7-SEPT3
BROGNARA, G. 144

PG26 - Caracterização e renormalização de grafos dirigidos através da utilização de análogos quânticos
MESSIAS, B. ; COSTA, L. F. 145

PG27 - Measurement of the deuterium to hydrogen flux ratio with the AMS-02 detector
BUENO, E. F. 146

PG28 - Caracterização de jamming avoidance response em peixes gymotiformes e modelo de deflexão de seu campo elétrico em coespecíficos
CESARINO, V. B. ; PINTO, R. D. 147

PG29 - Topological phase signature in Shubnikov-de Haas oscillations of 2D bulk systems
COSTA, J. V. I. 148

PG30 - Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas humanas
LEONARdo, D. A. ; NASCIMENTO, A. F. ; ANDRÉ, I. ; VALAdaRES, N. F. ; WATANABE, T. F. ; USON, I. ; GARRAT, R. C. 149

PG31 - Interação e internalização de fotossensibilizadores em parede celular microbiana
CAFACE, R. A. 151

PG32 - Luminescence properties and Up-conversion emission of Er3+ /Yb3+ /Tm3+ Doped Zinc-Tellurite Glasses
LOZANO, G. 152

PG33 - Investigation of PDT effects in 3D culture of breast cancer using the magnetic levitation method
CAMPOS, C.P.; IEMARK, I.; INAda, N.M.; KURACHI C. 153

PG34 - Test particles and field in binary black hole space-times
CAPOBIANCO, R. A. 154

PG35 - A model system based on synthetic rocks for morphological fluid dynamics studies in porous media
CARdoSO, C. ; OLIVEIRA, E. L. ; FOERSTER, B. U. ; FORTULAN, C. A. ; BONAGAMBA, T. J. ; PAIVA, F. F. 155

PG36 - Simetria local versus global: uma abordagem via teoria de recursos.
CARMO, R. S. ; SOARES-PINTO, D. O. 157

PG37 - Traditional conjugated polymer as efficient mixed conductors for high-performing electrochemical transistors
CAVASSIN, P. 158

PG38 - Peptídeo β -amiloide da doença de Alzheimer estudado por ressonância magnética nuclear de alta pressão
CAVINI, I. A. 159

PG39 - Desenvolvimento de nanocubos de SrTiO3 aplicados na fotossíntese artificial para produção de hidrogênio combustível
CENTURION, H. A. ; GONÇALVES, R. V. 161

PG40 - Aspectos da QCD na rede à temperatura finita
CERQUEIRA, M. C.; MENdeS, T. 162

PG41 - Transição de fase quântica de átomos ultrafrios imersos em condensado de Bose-Einstein com rede de vórtices.
CHAVIGURI, R. H. 163

PG42 - Quantum thermodynamics and non-thermal heat engines
CHERUBIM, C. F. ; de BRITO, F. B. ; deFFNER, S. 164

PG43 - Estudos estruturais de Glicosiltransferases envolvidas na síntese de biofilmes em Enterococcus faecalis
daNTAS, L. O. ; NASCIMENTO, A. 166

PG44 - Caracterização espectroscópica linear e não linear de moléculas de porfirinas ferroceno
COCCA, L. H. Z. ; SCIUTI, L. F. ; IGLESIAS, B. A. ; de BONI, L. 167

PG45 - Estudo do Transporte Iônico e Eletrônico em Condutores Mistos Orgânicos
C., R. 168

PG46 - A novel class of nanocarriers to enhance tumor immunogenicity
COMPARETTI, E. J. ; ZUCOLOTTO, V. 169

PG47 - Solitons and black holes in shift symmetric scalar tensor gravity
BRIHAYE, Y. ; HARTMANN, B. ; CÔNSOLE, F. 170

PG48 - Biosensors based on immobilized folic acid molecules for cancer cells detection
CORREIRA, A. R. ; VIEIRA, N. C. S. ; ZUCOLOTTO, V. 171

PG49 - Desenvolvimento de heterojunções dos sistemas BiVO4, Fe2Ti O5 e WO3 para a formação de eletrodos aplicados na fotossíntese artificial para geração de hidrogênio solar
CORRÊA, A. S. ; GONÇALVES, R. V. 172

PG50 - Desenvolvimento de uma metodologia para o estudo de biomassa lignocelulósica aliando ressonância magnética nuclear em alto e baixo campo e análise multivariada
CUNHA, G. P. ; ESPÍRITO SANTO, M. C. FILGUEIRAS, J. G. ; AZÊVEdo, E. R. POLIKARPOV, I. 173

PG51 - Estabilidade de fases ordenadas do modelo de Heisenberg-Kitaev em um campo magnético
CONSOLI, P. M. ; ANDRAde, E. C. 175

PG52 - Investigação de um condensado de Bose-Einstein dipolar em uma armadilha tipo bolha
DINIZ, P. de C.; HENN, E. de L. 176

PG53 - Caracterização de proteínas relacionadas à síntese e degradação do segundo mensageiro c-di-GMP em Pseudomonas aeruginosa
deLPHITO, L. ; NAVARRO, M. V. A. S. 178

PG54 - Two-photon absorption studies of BODIPY-like compounds based on BF2-naphthyridine complexes
DIPOLD, J. ; doNNELLY, J. ; ROMERO, E. E. ; CALHEIRO, T. P. ; BONACORSO, H. G. ; IGLESIAS, B. A. ; SIQUEIRA, J. P. ; HERNANdeZ, F. E. (2, 4); de BONI, L. ; MENdoNÇA, C. ... 180

PG55 - Optoelectronic properties of an organic light harvesting capacitor
LIMA FILHO, J. B. ; MIRANda, P. B. 181

PG56 - Fabricação de estruturas fotônicas em As2S3 via escrita direta com pulsos laser de femtossegundos LIFT em filmes finos de Trissulfeto de arsênio
ALMEIda, F. P. ; ALMEIda, J. M.P. ; MENdoNÇA, C. R. 182

PG57 - Desenvolvimento de tecnica combinando fotobiomodulação e radioterapia para otimização da resposta tumoral à radiação ionizante
FARIA, C. M. G. de; INAda, N. M. ; PRATAVIEIRA, S.; BAGNATO, V. S..... 183

PG58 - Optical thermometry based on Nd3+-doped fluorophosphate glasses
FARIA, W. 184

PG59 - Análise estrutural e biofísica das septinas de drosophila melanogaster
FERNANdeS, A. F.; LEONARdo, D. A. ; PEREIRA, H.M. ; GARRATT, R. C. 185

PG60 - Complex networks computational modeling of visual attention
FERREIRA, S. J. V. ; COSTA, L. F. 186

PG61 - πFlowMT – Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores many-core
FERREIRA, F. 187

PG62 - Avaliação de linhagens bacterianas termohalofílicas isoladas de óleo e rocha de reservatório de petróleo para a produção de biossurfactante
FERREIRA, J. F. ; BOSSOLAN, N. R. S. 189

PG63 - Estudo de sistemas Fermiônicos polarizados via espaços métricos
PICOLO, T. de (1; FRANÇA, V.V . ; OLIVEIRA, L. N. 191

PG64 - Construction of binary black hole and soliton space-times
..... 192

PG65 - Study of interaction between calibrated water, oil and carbonatic rocks by non-linear vibrational spectroscopy
PALMA FILHO, N. B. 193

PG66 - Construção de fermentador múltiplo para otimização da expressão de proteínas recombinantes
THIEMANN, O. T. ; STELMASTCHUK, L. B. F. 194

PG67 - Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente
FORTUNATO, T. C. ; MORIYAMA, L. T. 195

PG68 - Scaling of correlation functions of the random XX spin-1/2 chain
GETELINA, J. C. A. ; HOYOS NETO, J. A. 196

PG69 - Análise numérica da transferência defFrequência de um neurônio integra-e-dispara
GEWERS, F. L. ; COSTA, L. F. 197

PG70 - Medindo o Xmax de chuveiros atmosféricos extensos com telescópios Cherenkov
GILER, A. G. D. ; SOUZA, V. 198

PG71 - Nonlinear optical microscopy by nonlinear ellipse rotation: study of gorilla glass and polycrystalline semiconductor
GOMES, J. A. C. 200

PG72 - Desenvolvimento de protótipos portáteis de imagens de fluorescência para aplicações médicas.
GOVONE, A.B.; CASTRO NETO, J. C. 201

PG73 - Photodegradation analyse for PpIX using LEDs blue and red. Estimation of dose of singlet oxygen using explicit dosimetry for PDT
SÁNCHEZ, V. 202

PG74 - Correlation effects in the emergence of bound state in the continuum
GUESSI, L. H. ; OLIVEIRA. L. N. 203

PG75 - Obtenção, caracterização e avaliação de novas formas sólidas cristalinas de fármacos usados no tratamento da Alzheimer.
GÁMEZ, Y. M. 204

PG76 - Nonlinear features of femtosecond laser written waveguides in Gorilla© Glass and their structural properties
HENRIQUE, F. R. ; ALMEIda, G. F. B. ; MARTINS, R. J. ; ROSA, R. G. T. ; SIQUEIRA, J. P. ; ANDRADe, M. B. ; MENdoNÇA, C. R. 205

PG77 - Entendendo a origem (matemática e física) do Efeito Aharonov-Bohm
ISRAEL, I.; MAIA, L. P. 206

PG78 - Estudo da dinâmica de interação de diferentes tipos de curcumina em culturas planctônicas de bactérias.
PINTO JUNIOR, F. F. ; GUIMARÃES, F. E. G. 207

PG79 - Implementação de feixes de Bessel para guiamento de átomos frios entre câmaras de vácuo com armadilhas magneto-ópticas
RIVERO, D. ; ANGELIS, V. ; COURTEILLE, P. W. 208

PG80 - Study on the effect of photodinamic inactivation on Escherichia coli membrane mimetics
JOCHELAVICIUS, K. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. 209

PG81 - πFlowMR: um protótipo dataflow escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo
SILVA JUNIOR, J. T. ; MATIAS, P. ; RUGGIERO, C. A. 210

PG82 - Modelo estatístico para desenvolvimento de chuveiros atmosféricos
BOTELHO JUNIOR, M. V. ; SOUZA, V. 212

PG83 - Ghost propagator and geometry in lattice Gauge theories
LACHINI, N. P. ; MENdeS, T. ; CUCCHIERI, A. 214

PG84 - Astroparticles as a probe for Lorentz invariance violation
LANG,R. G.; MARTINEZ-HUERTA,H. ; SOUZA. V. de 215

PG85 - Análise das correlações quânticas do jogo da Batalha dos Sexos
LEAL, A. C. S. 216

PG86 - Enzimas lipolíticas de Bacillus licheniformis: caracterização bioquímica, biofísica e estrutural
LEITE, A. E. T. ; KAdoWAKI, M. A. S.; POLIKARPOV, I. 217

PG87 - Silica-based nanostructures carrying PpIX for cancer treatment
LEITE, I. S. ; VIVERO-ESCOTO, J. L. ; LYLES, Z. ; INAda, N. M. 218

PG88 - Control of non-Markovianity by the dissipation of a qbit
LIMA, R. B. B. ; SOARES-PINTO, D. O. ; de BRITO, F. B. ; de AZEVEdo, E. R. FILGUEIRAS, J. G. 220

PG89 - Estudo funcional e estrutural das proteínas spliceosomais U5-15K e U5-102K de Trypanosoma brucei
LIMA, A. L. de ; SILVA, N. T. A. da; THIEMANN, O. H. 221

PG90 - Soluções exatas do tipo Skyrmions auto-duais a partir dos ansatz conforme e mapa racional
FERREIRA, L. A. ; LIVRAMENTO, L. R. 223

PG91 - Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas
LUCHESI, A. C. F. 224

PG92 - Metrologia: Abordagem clássica vs. quântica
MAGNO, G. F. ; SOARES-PINTO, D. O. 225

PG93 - Análise termodinâmica de sistemas quânticos
MALAVAZI, A. H. A. ; BRITO, F. 226

PG94 - Influência do radical na seção de choque da A2F em moléculas de Chalconas
MANOEL, D. S. ; RODRIGUEZ, R.D. F. ; LIMA, R. S. ; NOda-PEREZ, C.; MARTINS, F. T. ; GONÇALVES, P. J. ; BONI, L. de; MENdoNÇA, C. R. 227

PG95 - Estudo da dinâmica de partículas aprisionadas em pinças ópticas
MARTINS, T. T. ; MUNIZ, S. R. ; ONCEBAY SEGURA, C. O. 228

PG96 - Estudo de chuveiros hadrônicos com alta produção eletromagnética
MARTINS, E. E. P. ; SOUZA, V. 229

PG97 - Demônio de Maxwell quântico em sistemas supercondutores com ambientes térmicos controláveis
MARTINS, G. F. ; BRITO, F. 231

PG98 - Utilizando o sistema e-Disciplinas como ferramenta de apoio, planejamento e avaliação de metodologias ativas no Ensino de Física
..... 232

PG99 - Formação de nanoestruturas em prata maciça com laser femtosegundo para aumento de fluorescência: nova perspectiva em desenvolvimento de biosensor
MATTOS, V. S. ; PAOLILLO, F. R. ; CAVALLINI, D. ; YASUOKA, F. M. M. ; GUIMARAES, F. E. G. ; SILVA, M. A. P. ; CASTRO NETO, J. C. 233

PG100 - Time and Coherence
MENdeS, L. R. S. 235

PG101 - Estudos sobre a polimerização de septinas e sua organização
MENdoNÇA, D. C. ; ARAUJO, A. P. U. ; PORTUGAL, R. V. ; GARRATT, R. C. 236

PG102 - Estudos estruturais dos complexos reguladores do curli bacteriano PdeR/DgcM e PdeR/DgcO em E. coli e estudos de estrutura-atividade de inibidores da CdaA de S. aureus
MENEGHELLO, R. ; NAVARRO, M. V. A. S. 237

PG103 - Transverse section image of a mass vortex lattice in a Bose-Einstein condensate
MERCAdo-GUTIERREZ, E. D. ; TAVARES, P. E. S. FARIAS, K. M. 239

PG104 - Efeito Raman para identificação de seguimentos de ácidos nucleicos
MIRANda, M. M. P.; MAREGA, E. 240

PG105 - Descelularização de traqueia utilizando equipamento multifuncional
MION, W. ; GUIMARÃES, F. E. G. ; BAGNATO, V. S ; deFFUNE, E. 241

PG106 - Representação e caracterização de circuitos amplificadores operacionais através de grafos
MIRANda, W. M. ; COSTA, L. F. 242

PG107 - Transições de fase em magnetos frustrados
MIRANda, M. M. J. ; HOYOS NETO, J. A 243

PG108 - A multi-dimensional elephant Random Walk Model
MARQUIONI, V. M. ; MAIA, L. P. 244

PG109 - CQESTR, avaliação em solos e manejos do Brasil.
deVAI-MORAES, R.R. ; VILLAS BOAS, P. R. 245

PG110 - Time reversal in operational-probabilistic theories applied to quantum collision theory
MORAZOTTI, N. A. C. 246

PG111 - Multifractality at the phase transition of 3D Anderson localization of light
MOREIRA, N. A. 248

PG112 - Estudo de vidros fosfatos mistos de Li, Cs e Sr
MORGUETTO, G. F. 249

PG113 - Análise evolutiva e estrutural de éxons pertencentes aos genes associados à diabetes Mellitus tipo 2
MOTA, D. M. D. ; de MARCO, R. 251

PG114 - Análise diferencial de CAZymes produzidas por Thielavia terrestris em biomassas pré-tratadas e in natura e caracterização heteróloga de enzimas com aplicações biotecnológicas
MULINARI, E. J. ; ZERBINI, M. V. ; MUNIZ, J. R. C. ; SEGATO, F. ; PRAde, R. 252

PG115 - Caracterização estrutural e bioquímica de uma esterase halotolerante de Bacillus licheniformis
NAKAMURA, A. M. ; KAdoWAKI, M. A. S. ; GOdoY, A. S. ; NASCIMENTO, A. S. ; POLIKARPOV, I. 254

PG116 - The mathematization of electrostatics in the 18th century: a historical-critical study
NARDI, L. M. C ; SILVA, C. C. 255

PG117 - Desenvolvimento de dispositivos para o monitoramento da bactéria F. nucleatum e mutações genéticas para a detecção precoce de câncer colorretal
NASCIMENTO, G. F. ; MATERON, E. M .; FARIA, R.C. ; OLIVEIRA J., O. N. 256

PG118 - Teoria de lasers de Hamiltonianos efetivos
OLIVEIRA NETO, F. 258

PG119 - Modelo simples para acoplamentos anômalos do Higgs e dados do LHC
daS NEVES, G. A.; BOITO, D. R. 259

PG120 - Diagnóstico de doenças em citros por meio de DeepLearn combinado a imagens de espectroscopia de fluorescência
NEVES, R. F. de O.; WETTERICH, B.; PARROS, E.; SOUSA, M. de 260

PG121 - Simulações de Monte Carlo para o cálculo de energia livre de ligação em sistemas biológicos
NOGUEIRA, V. H. R. ; NASCIMENTO, A. S. 261

PG122 - Growth of High-TC cuprate superconductor by pulsed laser deposition
MORGAdo, F. F. (1-3); SANTOS, P. C. S. (2-3); MORI, T. J. A. ; SCHIO, P. ; CEZAR, J. C. 262

PG123 - Descontaminação de fluidos circulantes com ultra-violeta aplicados em alimentos
OLIVEIRA, B. P. de ; BLANCO, K. C.; BAGNATO, V. S. 263

PG124 - Computational approach to simulate NMR data from fluid molecules diffusing in porous media
LUCAS-OLIVEIRA, E. ; ARAUJO-FERREIRA, A G. ; BONAGAMBA, T. 264

PG125 - Uma investigação em teoria de grupos
OLIVEIRA, C. E. 265

PG126 - Triagem de fragmentos para a proteína NS5 RNA polimerase dependente de RNA, um alvo farmacológico deZika vírus
OLIVEIRA, K. I. Z. ; MESQUITA, N. C. M. R. ; ZUNIGA, G. A. L. ; GOdoY, A. S. ; DIAS, M. V. B. ; OLIVA, G. 266

PG127 - Phototherapy applied to cellulose and chitosan hydrogels in Tissue engineering
ONO, B. A. 268

PG128 - Continuous loading of ultracold ground state molecules in a dipole trap using a single light beam
PASSAGEM, H. F.; COLIN-RODRIGUES, R.; TALLANT,J. ; MARCASSA, L. G. 270

PG129 - Transition from localized to extended states below the Fermi level in GaAs/AlGaAs multiple quantum well heterostructures
TITO, M. A. 271

PG130 - Assessing new biogenicity criteria of microfossils with a novel 3D imaging approach
MALdaNIS, L.(1-2); GALANTE, D.; BERTRAND, L. 272

PG131 - Identificação de minerais por meio de Redes Neurais Artificiais
QUEIROZ, A. A. A. E. de 273

PG132 - Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) for green-steam and foliar retention (GSFR) diagnosis in soybean leaves: an evaluation of calibration free (CF) method as a quantitative tool to analyze a complex biological matrix
RANULFI, A. C. (1-2); SENESI, G. S. ; WATANABE, A. ; CAETANO, J. ; MEYER, M. ; VILLAS BOAS, P. R. ; MILORI, D. M. B. P. 274

PG133 - Desenvolvimento de biossensores de baixo custo para a detecção de biomarcadores de câncer
IBANEZ-REDIN,G.; OLIVEIRA J., O. N. de; GONÇALVES, D. 276

PG134 - Dispositivos de aplicação intradérmica para otimização nos processos da formação e distribuição de PpIX no tratamento de câncer de pele por terapia fotodinâmica
REQUENA, M. B ; RUSSIGNOLI, P. E ; SALVIO, A. G. ; FORTUNATO, T. C ; VOLLET FILHO, J. D. (1,3); PRATAVIEIRA, S. ; FERNANda, A. D. ; doNNELLY, R. F. ; BAGNATO, V. S 277

PG135 - Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes
RIGHETTO, G. M. ; SANTOS FILHO, N. A. ; CILLI, E. M. ; BELTRAMINI, L. M. ; CAMARGO, I. L. B. C 279

PG136 - Aquisição de biopotencial em uma interface sensorial sem fios para optogenética
BRUNELLI, R. ; ANDRAde, R. A. P. ; MASCARENHAS, S. 281

PG137 - Avaliação de um sistema portátil de tempo de vida de fluorescência para diferenciar lesões de pele clinicamente semelhantes
ROMANO,R. A. ; PRATAVIEIRA, S. ; KURACHI, C. 282

PG138 - Estudos no diamante para aplicações em tecnologias quânticas
ONCEBAY SEGURA, C. O. ; ALMEIda, J. M. P. ; MENdoNÇA, C. R. ; MUNIZ, S. R. 283

PG139 - Estudos computacionais para o planejamento de novos moduladores da proteína tubulina com propriedades antitumoraispropriedades antitumorais
PALOMINO-SALCEdo, D. L. ; MAGALHÃES, L. G. ; ANDRICOPULO, A. D. 284

PG140 - Quantum subradiance in a ultracold dilute cloud of two-level atoms driven by a scalar light
ESPIRITO SANTO, T. S. do 285

PG141 - Estudo da via de incorporação de selenocisteínas: compreensão dos mecanismos de interações macromoleculares
FERNANdeS, J. S. ; SERRAO, V. H. B. ; FERNANdeS, A. F. ; BASSO, L. G. M. ; NETO, M. O. ; THIEMANN, O. H. 286

PG142 - Is it possible to model a gluon plasma as superfluid helium?
MENdeS, T.; SERENONE, W. M. 288

PG143 - Representações de superfícies moleculares em harmônicos esféricos para simulação de formação de complexos entre proteínas
SILVA, S. R. ; MONTALVÃO, R. W. 289

PG144 - Caracterização estrutural das septinas de levedura (Saccharomyces cerevisiae) Cdc3, Cdc10, Cdc11 e Cdc12
SILVA, R. M. 291

PG145 - Epidemic spreading with awareness and different time scales
SILVA, P. C. V. ; VAZQUES, F. ; MORENO, Y. ; RODRIGUES, F. A. 293

PG146 - Desenvolvimento e aplicações de nanopartículas poliméricas contendo ácido aminolevulínico (ALA) para o tratamento de tumores de pele mais profundos
SILVA, G. R. (1,2); SANTOS, A. L. ; INAda, N. M. 294

PG147 - Conceito de visões ao PyMR e integração ao Spyder
SILVA, L. C. R. ; PIZETTA, D. C. ; TANNÚS, A. 295

PG148 - Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos em regime turbulento
SMAIRA, A. F. 296

PG149 - Efeitos coletivos nos processos de interação radiação-matéria: superátomos, superradiância e superabsorção
SOARES, P. M. ; ROSETTI, R. F.; MORAES NETO, G. D. de ; VILLAS-BOAS, C. J. ; MOUSSA, M. H. Y. 297

PG150 - Estudo da resposta bacteriana e avaliação do potencial de desenvolvimento de resistência em múltiplas sessões de terapia fotodinâmica antimicrobiana
SOARES, J. M. ; BLANCO, K. C. 299

PG151 - Estudo comparativo entre dinâmica molecular acelerada por Gaussianas (GaMD) e dinâmica molecular adaptativamente enviesada (ABMD) por amostragem ampliada e avaliação da energia livre
SOUSA, S. C.; NASCIMENTO, A. S. 300

PG152 - Raios gamma e ondas gravitacionais originárias de cordas cósmicas supercondutoras excitadas
SOUSA, G. T. T. ; HARTMANN, B. 301

PG153 - Descoberta de derivados de Acridina e de Marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum
SOUZA, G. E. 302

PG154 - Criação de um emulador para o espectrômetro digital do CIERMag
SOUZA, P. V. B. D. ; VIdoTO, E. L. G. ; MARTINS, M. J. ; TANNÚS, A. 304

PG155 - Deposição de materiais metálicos em pó a laser baseado em controle por visãocComputacional
SOUZA, M. A. A. de ; CASTRO NETO, J. C. 305

PG156 - Descoberta de derivados 4-Quinolinonas como candidatos a fármacos aAntimaláricos: caracterização da atividade antiplasmodial In Vitro e ensaios de combinação
de SOUZA, J. O. ; ALMEIda, S. M. ; AGUIAR, A. C. C. ; OLIVA, G. ; CORREA, A. ; GUIdo, R. V. C. 306

PG157 - Triagem virtual em larga escala aplicados na descoberta de novos inibidores da cruzaína e biologicamente ativos na forma amastigota de Trypanosoma cruzi
SOUZA, A. S. 308

PG158 - Síntese supramolecular de um cocristal multi-fármaco via mecanoquímica: o caso da 5-Fluorocitosina Isoniazida
SOUZA, M. S. ; DINIZ, L. F. ; VOGT, L. ; CARVALHO J., P. S. ; D´VRIES, R. F.; ELLENA, J. .. 310

PG159 - Efeitos de agentes entrecruzantes na morfologia e na condutividade elétrica de transistores eletroquímicos orgânicos.
SOUZA, R. F. S. ; FARIA, G. C. 312

PG160 - The 3-body problem in classical mechanics with applications to astrophysics and cosmology
TAKEda, C. S. ; HARTMANN, B. 314

PG161 - Recombination dynamics of Landau levels in InGaAs/InP quantum well
TAVARES, B. G. M. ; CASTRO, E. D. G. ; TEOdoRO, M. D. ; LAPIERRE, R. R. ; PUSEP, Y. A. 315

PG162 - Geração de estados não-clássicos via engenharia dissipativa
TEIZEN, V. F. ; MORAES NETO, G. D. ; MONTENEGRO, V. ; VERNEK, E. 316

PG163 - Analytical methods for determining the existence of non-linear solutions in classical field theory
TOMA, C. E.; HARTMANN, B. 317

PG164 - Investigação das metodologias de produção de Taq DNA polimerase Hot Start e suas implicações nos custo e atividade da enzima
TORRES, N U. (1,2); COSTA, F. C. ; BERNARdeS, A. (1,2); OLIVA doTTA, M. A. V. (1,2); MALUF, F. V. (1,2); GUIdo, R. V. C 318

PG165 - Formulação de quarks para a QCD na rede
VISCARDI, L. A. M. ; MENdeS, T. 320

PG166 - Análise topológica da densidade de carga eletrônica teórica em sistemas periódicos
WANdeRLEY, A. B. ; CLAVIJO, J. C. T. ; SOUZA, M. S. ; CAMPS, I. ; ELLENA, J. 321

PG167 - Single molecule transport phenomena through one nanopore
ZAGO, L. A. ; GUIMARÃES, F. E. G. 322

PG168 - Imobilização de FS em superfícies poliméricas aplicadas a área médico-hospitalar
ZANGIROLAMI, A. C. ; BLANCO, K. C. 323

PG169 - Caracterização e análise evolutiva de introns mínimos em platelmintos.
ZUVANOV, L. ; de MARCO, R. 325

PG170 - Estudo comparativo da compressibilidade isotérmica de um gás bosônico via modelos de variáveis globais e aproximação de densidade local
MARTINS, E. B. ; TELLES, G. D. 327

PG171 - Análise de imagens de fluorescência na detecção de doenças de soja
SBRISSA, D. A. ; MILORI, D. M. B. P. 328

PG172 - Interaction of water with the phospholipid head group studied by molecular dynamic simulations
HERNANdeZ-SARRIA,J. J. ; OLIVEIRA J., O. N.; MEJIA-SALAZAR, J. R. 330

IC1

Ferramenta de visualização de sistemas caóticos visando a procura de pseudo-aleatoriedadepseudo-aleatoriedade

ALVARENGA, J. P. V. [1]; BRUNO, O. M. [2]

j.p.valle@df.ufscar.br

[1] Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Analisar a dinâmica dos mapas caóticos acoplados usando a abordagem de deep-zoom, que extrai k-dígitos à direita dos dígitos de precisão (1), visando encontrar propriedades pseudo-aleatórias que possam ser usadas para a criptografia. é possível variar os parâmetros da composição dos mapas. De acordo com estes resultados, foram encontradas algumas regiões caóticas que merecem destaque usando a abordagem deep-zoom. (1) Métodos e Procedimentos: Para poder atingir o nosso objetivo principal, é importante o desenvolvimento de uma ferramenta de visualização que nos permita interagir com os diferentes parâmetros que possuem os sistemas dinâmicos. Assim, durante os primeiros meses desta iniciação científica foi desenvolvida uma ferramenta de visualização, usando a linguagem de programação Python (Jupyter notebook). Por meio desta, foram desenvolvidas diversas formas de visualização, tais como: Diagrama de Bifurcação, Expoente de Lyapunov, Diagrama de Cobweb, Histograma, Diagrama de Poincaré, em 2D e em 3D, e gráfico de evolução temporal. Resultados: Para avaliar a ferramenta desenvolvida, primeiro foram estudados dois sistemas dinâmicos bem conhecidos na literatura (2): o mapa logístico e o mapa de tenda com parâmetros variando de 0 a 4 e 0 a 2, respectivamente, e o termo inicial entre 0 e 1. Assim, neste trabalho foi feita a operação de composição destes mapas. De acordo com estes resultados, foram encontradas algumas regiões caóticas que merecem destaque usando a abordagem deep-zoom. (1) Conclusões preliminares: Nesta primeira fase foi desenvolvida uma ferramenta de visualização que permite interagir com os diferentes parâmetros dos sistemas dinâmicos. Para assim poder encontrar propriedades interessantes quando tais mapas caóticos sejam acoplados.

Palavras-chave: Caos. Sistemas dinâmicos. Ferramentas de visualização.

Referências:

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

2 DEVANEY, R.L. **A first course in chaotic dynamical systems**: theory and experiment. Boca Raton: CRC Press, 1992.

IC2

Encapsulamento de doxorrubicina em PLGA para controle do perfil de liberação.

ANTONIO, L. C. [1]; RIBOVSKI, L. [1]; ZUCOLOTTO, V. [1]

luana.antonio@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A doxorrubicina (DOX) é uma antraciclina amplamente utilizada no tratamento de câncer de mama, no entanto, doses elevadas desse fármaco podem causar efeitos colaterais graves como a cardiomiopatia.(1) Os nanocarreadores (NCs) poliméricos mostram-se uma alternativa para a solução desse impasse, uma vez que permitem uma distribuição mais específica da DOX. No entanto, alguns aspectos desses NCs ainda precisam ser aperfeiçoados, entre eles o controle de liberação do composto encapsulado. Dessa forma, propomos o encapsulamento da doxorrubicina em NCs poliméricos de poli(ácido lático-co-glicólico) (PLGA), via método de emulsificação/difusão de solvente(2) e consequente otimização da síntese para controle de liberação eficiência de encapsulamento do fármaco. Acrescentou-se o polissacarídeo Dextran como agente de revestimento dos NCs.(3) Ainda, variou-se o pH da fase externa (7,4, 8,6 e 10,0) da síntese com base nos diferentes estados de ionização da DOX, analisando eficiência de encapsulamento (EE) e estabilidade do carreador. Embora ocorra um aumento da EE com os pHs 8,6 e 10,0, em pH 10,0 constatou-se agregação do material em um curto período de tempo. A análise do perfil de liberação permite observar que uma menos quantidade de material é liberada durante o "burst release" dos NCs sintetizados com pH da fase externa igual a 8,6 e 10. Também, a liberação da DOX dos NCs ocorre mais rapidamente em pH 5,0 do que quando realizada em pH 7,4. Os ensaios de viabilidade celular (MTT) realizados nas linhagens celulares H9C2 e MCF-7 apresentam indícios de maior toxicidade quando comparados aos NCs sem o polissacarídeo, o que sugere uma maior captação dos NCs com dextran. Entretanto, mais análises serão realizadas para confirmação da hipótese, entre elas microscopia confocal de fluorescência.

Palavras-chave: Nanocarreadores poliméricos. Doxorrubicina. Liberação sustentada. Polissacarídeos. Nanomedicina.

Referências:

1 THORN, C.et al. Doxorubicin pathways. **Pharmacogenetics and Genomics**, v.21, n. 7, p.440-446, 2011.

2 PIEPER, S.; LANGER, K. Doxorubicin loaded PLGA nanoparticles: a systematic evaluation of preparation techniques and parameters. **Materials Today**, v. 4, suppl. 2, p. S188-S192, 2017.

3 LEMARCHAND, C.; GREF, R.; COUVREUR, P. Polysaccharide-decorated nanoparticles. **European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics**, v. 58, n. 2, p. 327-341, 2004.

IC3

Aplicação da RMN para o estudo de rochas reservatório de petróleo.

ASNIS, Y. P. [1]; MONTRAZI, E. T. [1]; PEZZATTI, R. R. [1]; BONAGAMBA, T. J. [1]

yuri.asnis@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Este presente trabalho de Iniciação Científica apresenta um estudo inicial sobre rochas reservatório de petróleo utilizando técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) para estudo da porosidade e distribuição de poros das mesmas. Assim, foi realizada uma descrição semi-clássica do fenômeno de RMN destacando a origem do decaimento exponencial no sinal oriundo da magnetização do sistema (1), o conceito de relaxação transversal e a sequência de pulsos de radiofreqüência necessárias para obtenção do tempo de relaxação transversal (T2) conhecida como CPMG (Nome referente aos cientistas que desenvolveram o método - Carr, Purcell, Meiboom e Gill) (1-2), o software desenvolvido para tratamento e interpretação dos dados baseado na Transformada Inversa de Laplace e uma descrição básica das principais características das rochas sedimentares. (3) O estudo deste trabalho foi realizado em torno de um kit de 22 (vinte e duas) rochas adquiridas da empresa Kocurek. Para os cálculos de porosidade, foram-se então utilizadas duas técnicas, uma direta (porosidade por massa) e uma indireta (porosidade por RMN) onde foi-se observado a equivalência das duas técnicas. Sobre as distribuições de poros nas rochas, foi-se utilizado a técnica de transformação inversa dos decaimentos exponenciais e observou-se que há uma predominância de macroporos nos arenitos e uma predominância de microporos nos carbonatos.

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear. Rochas reservatório de petróleo. Tempo de relaxação transversal.

Referências:

1 MONTRAZI, E. T. **Estudo da difusão de moléculas de fluidos em meios porosos por técnicas de Relaxation Exchange NMR**. 2016. 156 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

2 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. J.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance**: petrophysical and logging applications. Amsterdam: Pergamon, 2002. 293 p. (Handbook of geophysical exploration: seismic exploration, 32).

3 ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de reservatórios de petróleo**. Rio de Janeiro: Interciência, 2006. 808 p.

IC4

Non-degenerate k.p method applied to D3d symmetry crystalline structures

BALTHAZAR, A. L. [1]

balthazar.arthur@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The objective of this work is the study and application of group theory and representation theory into the k.p method for non degenerate states formulation in crystalline structures with a periodic potential and D3d group symmetry. Substances with crystalline structures possess a electric periodic potential corresponding to its structure geometry. Through Bloch's Theorem applied into Schrödinger's equation for a free electron, we can formulate a wave vector dependent hamiltonian which obey the geometry of the system. Identifying the group which the crystalline structure obeys we can impose that the obtained hamiltonian fallows the group symmetry, Its matrix elements will transform such as irreducible representation specific to the group, and then imposing invariance under the operations belonging to the symmetry, which can be found in (1) we can identify null matrix elements e how many independent values there can be, simplifying our expression for the eigenvalues. After de k.p method formualtion to D3d group, it was possible to identify nine possible matrix elements of our hamiltonian, of which, by imposing group operations and selection rules based upon representation orthogonality, as done in (2), four were nullified and from the five remaining, four were equalized. Effectively, it was possible to conclude that the possible energy bands for these states would not have Pz with Px or Py linear moment interaction. It was then possible to simplify the k.p method with this work, even though D3d symmetry does not allow further simplification such as other more known groups such as Td and C6v, obeyed by the famous Wurtzite and Zincblend structures.

Palavras-chave: Group theory. k.p method. Selection rule.

Referências:

1 ALTMANN, S.; HERZIG, P. **Point-group theory tables**.Oxford: Clarendon Press, 1994

2 DRESSELHAUS, M.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. **Group theory**: application to the physics of condensed matter.Berlin: Springer Verlag, 2008.

IC5
Microfabricação em GaN com pulsos de femtossegundos

BARBOSA, G.R. [1]; ALMEIda, G. F. B. [1]; MENdoNÇA, C. R. [1]

gustavo.rocha.barbosa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho visa estudar o processo de microfabricação com pulsos de femtossegundos em GaN; especificamente determinar a fluência de limiar para microfabricação. As as propriedades ópticas da amostra de GaN foram caracterizadas através de espectroscopia de absorção UV-Vis. A microfabricação foi feita utilizando um laser de Ti:Safira que gera pulsos de 50 fs em 800 nm a uma taxa de repetição de 5 MHz. O feixe laser é focalizado através de uma lente objetiva (40x e NA = 0,65) na amostra, a qual é translada por um estágio de translação controlado por um computador. Para determinar a fluência de limiar foram aplicados dois métodos, o D-Scan (1) e o método de Liu. (2) Neste último a microfabricação é feita na superfície da amostra com uma velocidade de varredura fixa e variando a energia incidente para cada linha microfabricada. No D-Scan observa-se a relação do diâmetro máximo do perfil de ablação em função da varredura diagonal da amostra. Dos resultados de espectroscopia UV-Vis obtivemos uma energia de gap de 3,37 eV para o GaN, valor este em pleno acordo com a literatura. (3) Pela técnica de D-Scan foi obtida uma fluência de limiar de 0,14 J/cm^2 . Para o método de Liu foram fixadas três velocidades de varredura (0,005 mm/s, 0,19 mm/s e 0,4 mm/s) e determinadas correspondentes três energias de limiar (4,7 nJ, 3,6 nJ e 1,8 nJ), que correspondem a um fluência limiar média de 0,21 J/cm^2. Portanto, os resultados obtido pelas duas técnicas estão em boa concordância, estando também coerentes com os valores reportados na literatura.

Palavras-chave: Óptica. Pulsos ultracurtos. Microfabricação.

Referências:

1 SAMAD, R.E; VIEIRA Jr, N.D. Geometrical method for determining the surface damage threshold for femtosecond laser pulses.**Laser Physics,** v.16, n.2, p.336-339,2006.

2 LIU, W.M. Simple technique for measurements of pulsed Gaussian-beam spot sizes.**Optics Letters,** v.7, n,5, p.196-198,1982.

3 LIU, W.M. et al. Ablation of GaN using a femtosecond laser.**Chinese Physics Letters**, v.19, n.11, p.1711, 2002.

IC6

Expressão e purificação do complexo constituído pelas proteínas não estruturais NS2B e NS3 protease do vírus da Zika

BERTOLINE, L. M. F. [1]; OLIVEIRA, K. Z. [1]; OLIVA, G. [1]; MESQUITA, N. C. M. R. [1]

leticia.bertoline@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Introdução: O vírus Zika (ZIKV), membro da família *Flaviridae*, chegou ao Brasil ao final do ano de 2013 e se alastrou pelo país. Durante essa epidemia, a infecção de grávidas pelo vírus foi relacionada ao aumento no número de recém-nascidos com microcefalia, estabelecendo, assim, um mecanismo de transmissão mãe-feto. Ao longo dos últimos 3 anos, as infecções por ZIKV ainda foram relacionadas com outras doenças neurológicas tanto em adultos como em crianças. (1) Embora a situação atual da Febre Zika esteja atenuada no Brasil, segundo o Boletim epidemiológico semana 30, têm-se registro de 2155 casos confirmados, sendo 298 gestantes e 2 óbitos, este ano, mostrando a necessidade de estudos que impeçam uma nova epidemia ou a controlem caso a mesma ocorra. O ZIKV é composto por três proteínas estruturais e sete não estruturais. Dentre estas últimas, a NS3 possui funções essenciais a replicação viral. O domínio serino-protease da NS3 ($NS3^{Pro}$) possui função proteolítica sobre a poliproteína do ZIKV. A $NS3^{Pro}$ apresenta-se inativa, dependendo da interação com a porção C-terminal da NS2B para ativar-se. Assim, a NS2B atua como cofator da atividade proteolítica da $NS3^{Pro}$. (2) Objetivos: Com o intuito de se estudar o complexo NS2B-$NS3^{Pro}$ e obtê-lo para busca de inibidores de sua função, objetivamos estabelecer um protocolo de expressão e purificação para o complexo. Metodologia: Culturas de *E.coli Rosetta 2* foram transformadas com vetor de expressão contendo a região codificante do complexo NS2B-$NS3^{Pro}$. O complexo foi expresso em meio Luria Bertane (LB). A purificação foi realizada por meio de cromatografia por afinidade seguida de filtração em gel. Todas as etapas foram avaliadas por SDS-Page 12,5%. A atividade da proteína foi avaliada seguindo-se protocolo estabelecido por Phoo et al. (2) Resultados: Após a obtenção de proteína expressa, inúmeros testes de solubilidade e purificação foi possível obter o complexo protéico em solução. A fim de obter-se a NS2B-$NS3^{Pro}$ com maior grau de pureza foi realizada uma filtração em gel. Após essas etapas a atividade da proteína em solução foi avaliada e confirmada. Conclusões e Perspectivas: Tendo estabelecidos os protocolos de expressão e purificação em baixa escala para o complexo NS2B-$NS3^{Pro}$ e estando a proteína ativa em solução, otimizaremos estes protocolos para maior escala. Visamos, ainda, padronizar o protocolo de atividade protease do complexo para futuras triagens de ligantes e obter proteína para realizarmos tanto sua caracterização biofísica quanto ensaios de cristalização.

Palavras-chave: ZIKV. Protease.

Referências:

1 LOWE, R. et al. The zika virus epidemic in Brazil: from discovery to future implications. **International Journal of Environmental Research and Public Health**, v. 15, n. 1, p. 96-1-96-18, 2018.

2 PHOO, W. W. et al. Structure of the NS2B-NS3 protease from Zika virus after self-cleavage. **Nature Communications,** v. 7, p. 13410-1-13410-8, 2016. doi: 10.1038/ncomms13410.

IC7
Simulação estocástica de metabolismos

BORSATO, V. E. K. [1]; FONTANARI, J. F. [1]

vinicius.borsato@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Baseado em uma caracterização fenomenológica dos atributos essenciais que constituem um sistema vivo, o chemoton (1) é um modelo teórico de célula minima proposto pelo pesquisador húngaro Tibor Gánti, cujo funcionamento contempla, a princípio, critérios absolutos de um sistema vivo: automanutenção, proliferação e evolução. Construído a partir de um sistema hipotético de reações químicas que supostamente satisfazem tais critérios, o chemoton é composto por três sistemas autocatalíticos (2) estequiometricamente acoplados entre si: um sistema metabólico, um mecanismo de replicação de homopolímeros (templates) e uma membrana. O sistema metabólico transforma nutrientes provenientes do meio extra-celular nos monômeros necessários para a polimerização dos templates. Além disso, subprodutos da reação de polimerização dos templates e do sistema metabólico, quando combinados, formam os componentes de membrana do chemoton. Quando a área superficial da membrana atinge um valor crítico, o chemoton sofre fissão binária, dividindo-se em duas novas células. A combinação dos três sistemas formam uma unidade capaz de auto-manutenção e proliferação. O mecanismo de replicação de templates é constituído por uma etapa de iniciação e uma etapa de elongamento. Ao contrário da etapa de elongamento, a etapa de iniciação só pode ocorrer quando a concentração de monômeros atinge uma concentração mínima. Em princípio, o tamanho dos templates afeta o tempo de divisão do chemoton, possibilitando o surgimento de uma vantagem adaptativa e, consequentemente, evolução. No presente trabalho, foram realizadas simulações computacionais do chemoton a partir do algoritmo de Gillespie (3), um método estocástico exato que realiza as reações químicas do sistema uma por vez. Em contraste a métodos numéricos que abordam reações químicas acopladas por um tratamento contínuo, o método de Gillespie permite uma reprodução mais precisa de eventos aleatórios e deixa o sistema suscetível a efeitos decorrentes da total ausência de uma espécie química. A fim de investigar se variações no tamanho do template podem oferecer uma vantagem adaptativa à reprodução do chemoton, realizou-se simulações estocásticas de populações de chemotons em um contexto de competição por nutrientes limitados e sob pressão adaptativa do meio.

Palavras-chave: Chemoton. Gillespie.

Referências:

1 GÀNTI, T. **Chemoton theory**: theory of living systems. New York: Kluwer Academic, 2003. (Mathematical and computational chemistry, v. 2).

2 PRIGOGINE, I.; NICOLIS, G. Self-organization in nonequilibrium systems: towards a dynamic of complexity. In: HAZEWINKEL, M.; JURKOVICH, R.; PAELINCK, J. H. P. (Eds.). **Bifurcation analysis**: principles, applications and synthesis. Dordrecht: Springer, 1985. p. 3-12.

3 GILLESPIE, D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. **Journal of Physical Chemistry**, v. 81, n. 25, p. 2340-2361, 1977.

IC8

Desenho e caracterização de novas formas solidas cristalinas de antidepressivos

CECILIO, N. G. [1]; ELLENA, J. A.[1]

nataliageraldo@msn.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Durante este trabalho, objetivou-se planejar, obter e caracterizar novas formas multicomponentes sólidas cristalinas do antidepressivo da classe dos Inibidores Seletivos de Recaptação de Serotonina, a Paroxetina (PRX) com o intuito de modular suas propriedades físico-químicas com base nos Princípios da Engenharia de Cristais (1), a qual é utilizada no controle de qualidade assim como outros fatores biotecnológicos envolvidos no desenvolvimento de um fármaco . Realizou-se uma análise estrutural do insumo farmacêutico ativo (IFA) PRX e em seguida a busca de coformadores com base nas formas sólidas já reportadas no *Cambridge Structural Database (CSD)*.(2) Para iniciar os testes de cristalização, a base livre do Cloridrato de Paroxetina 0.5 H_2O foi extraída e, em seguida, reagida em proporções estequiométricas com o ácido sórbico utilizando como solvente álcool etílico. Monocristais viáveis foram obtidos diretamente pela técnica de evaporação de solvente a 25 °C. Para a determinação da pureza do IFA material de partida, realizou-se difração de raios-X em pó (DRXP) enquanto a amostra obtida foi analisada termicamente pelas técnicas de calorimetria exploratória diferencial (CED), termogravimetria (TG) e microscopia termo-óptica (MTO, *Hot-Stage*). As análises térmicas indicam um comportamento diferente dos materiais de partida (IFA e coformador), indicando uma possível nova forma sólida. Para a confirmação, outras análises devem ser realizadas.

Palavras-chave: Paroxetina. Cristalografia. Análise térmica.

Referências:

1 ELLENA, J.A. **Caracterização no estado sólido de insumos farmacêuticos ativos:** planejamento racional de novas formas cristalinas. 2011. 387p. Tese (Livre Docência) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

2 GROOM, C. R.; BRUNO, I. J.; LIGHTFOOT, M. P.; WARD, S. C. The Cambridge structural database. **Acta Crystallographica B**, v.72, pt.2,171–179, 2016.

IC9

Avaliação do metabolismo do ferro de células expostas à nanopartículas de óxido de ferro

CHAVES, B. F. [1]; CANCINO, J. [2]

brubfarias@hotmail.com

[1] Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

O avanço da nanotecnologia nas últimas décadas vem promovendo inovações com aplicações em diferentes áreas, o que faz com que a nanotoxicologia ganhe maior relevância. (1-2) Avaliar o potencial tóxico de um nanomaterial é essencial para que cada vez mais opções possam ser consideradas para uso em diagnósticos e tratamentos de doenças que afetam profundamente a sociedade, sendo o câncer uma das principais. É sabido que o metabolismo de células cancerosas age de forma diferente se comparado ao de células saudáveis, o que pode ser muitas vezes atribuído aos diferentes ligantes expressos na superfície dessas linhagens. (2) Neste sentido, este projeto visou avaliar o efeito de nanopartículas de óxido de ferro Fe_3O_4 em células cancerosas e saudáveis, com o objetivo de elucidar as reações causadas em metabolismos distintos. Durante a realização deste projeto, as nanopartículas foram sintetizadas pelo método de co-precipitação, sendo sintetizadas nanopartículas magnéticas de óxido de ferro Fe_3O_4 sem revestimento e revestidas com os polímeros poli(4-estirenosulfonato de sódio) (PSS), poli(cloreto de dialildimetil amonio) (PDAC), alcoól polivinílico (PVA) e poli(etileno glicol) (PEG). Após a caracterização por técnicas como espectroscopia UV-Vis, espalhamento de luz dinâmico (DLS), microscopia eletrônica de varredura (MEV), entre outras, resultados satisfatórios foram obtidos para as nanopartículas magnéticas de óxido de ferro sem revestimento e revestidas com o polímero PDAC, sendo elas as selecionadas para ensaios celulares *in vitro*. Posteriormente, foram realizados ensaios celulares com duas linhagens celulares distintas, uma cancerosa (A549) e outra saudável (H9C2), para determinar a viabilidade celular e concentração intracelular de ferro após tratamento com as nanopartículas. Os estudos *in vitro* indicaram que mesmo uma pequena quantidade de NPs Fe_3O_4 internalizada não é suficiente para causar efeito citotóxico considerável em células cancerosas. Em contrapartida, as nanopartículas Fe_3O_4 revestidas com PDAC causaram maior diminuição da viabilidade celular e maior internalização do ferro para ambas as linhagens, porém esses efeitos foram ligeiramente maiores em células cancerosas, provavelmente devido a maior presença de transferina, que é responsável pela captação de ferro extracelular.

Palavras-chave: Nanopartículas magnéticas. Nanomedicina. Nanotoxicologia.

Referências:

1 ASSA, F. et al. A biotechnological perspective on the application of iron oxide nanoparticles. **Nano Research**, v. 9, n. 8, p. 2203-2225, 2016.

2 CANCINO, J.; MARANGONI, V. S.; ZUCOLOTTO, V. Nanotecnologia em medicina: aspectos fundamentais e principais preocupações. **Quimica Nova**, v. 37, n. 3, p. 521-526, 2014.

IC10

Estudo da toxicidade de nanopartículas de CuO e do sal CuSO4 para Daphnia magna

CHIQUITO, J. G. G. [1]; SILVA, B. P. C. [1]; MANSANO, A. S. [1]

joaogabrielchiquito@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanopartículas de óxido de cobre (CuO NPs) têm sido aplicadas em diversas áreas devido às suas excelentes condutividades térmicas e elétricas. O rápido aumento no uso e na produção das NPs CuO contribui para a presença destes contaminantes nos ecossistemas aquáticos. Os efeitos toxicológicos de NPs CuO nos organismos aquáticos ainda não foram bem estudados, o que representa um risco para a biota. O objetivo deste estudo foi avaliar a toxicidade das nanopartículas de óxido de cobre (NPs CuO) e do sal $CuSO_4$ para *Daphnia magna* por meio de testes de toxicidade aguda (imobilidade) e crônica (reprodução) e ensaios de alimentação (taxas de ingestão). As NPs CuO foram sintetizadas de acordo com o método de Misra et al. (2014) (1) e posteriormente caracterizadas por difração de raios-X (DRX) e espalhamento de luz dinâmico (DLS). O cultivo dos organismos e os testes agudos (48h) e crônicos (21 dias) foram realizados de acordo com as normas da OECD (2008) (2). Para as taxas de alimentação, foi utilizado o método de McWillian e Baird (2002) (3). De acordo com os resultados, as NPs CuO apresentaram o tamanho médio de 30 nm e o potencial zeta de -23,5 mV. O DRX confirmou a formação de CuO. Em exposição aguda, as NPs e o $CuSO_4$ causaram imobilidade aos cladóceros em baixas concentrações (CE_{50} de 0,97 e 0,08 mg Cu L^{-1} para as NPs e sal, respectivamente). Em exposição subletal, os compostos reduziram significativamente a reprodução e inibiram a alimentação nas concentrações de 0,04 mg Cu L^{-1} para as NPs CuO e em 0,02 e 0,04 mg Cu L^{-1} para o $CuSO_4$. Com base nos nossos resultados, conclui-se que as NPs CuO e o $CuSO_4$ causam efeitos negativos aos organismos. Nossos resultados podem contribuir para a avaliação de risco ecológico das NPs CuO e a fundamentação de ações regulatórias.

Palavras-chave: Nanomateriais. Cladócero. Nanotoxicidade. Reprodução. Alimentação.

Referências:

1 MISRA, S.K. et al. Comparative study using spheres, rods and spindle-shaped nanoplatelets on dispersion stability, dissolution and toxicity of CuO nanomaterials. **Nanotoxicology**, v. 8,n.4, p.422-432,2014.

2 OECD. **Guideline for testing of chemicals:** Daphnia magna reproduction test. No. 211. [s.l.]:OECD Publishing,2008.

3 MCWILLIAM, R.A.; BAIRD, D.J. Postexposure feeding depression: a new toxicity endpoint for use in laboratory studies with Daphnia magna. **Environmental Toxicology and Chemistry,** v. 21, n.6,p.1198–1205,2002.

IC11

Influência da estrutura de comunidades nas caminhadas aleatórias em redes complexas

CONTI, F. A.

flavio.conti@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Redes complexas, que representam sistemas através de um conjunto de elementos (denominados *nós* ou *vértices*) e suas interações (denominadas *ligações* ou *arestas*), têm demonstrado similaridades de estrutura e comportamento que permitiram relacionar diversas áreas de conhecimento. Uma característica comum entre sistemas representados como redes complexas é a organização em *comunidades*, o que significa que existem grupos de nós que são mais fortemente conectados entre si do que com os demais nós da rede. (1) Diversos processos dinâmicos são estudados em redes, sendo que um exemplo importante é a *caminhada aleatória*, que representa um processo de difusão. (2) Na caminhada aleatória em redes, um caminhante presente em um nó vai no próximo instante de tempo para um de seus nós vizinhos (um nó ao qual o nó corrente está conectado por uma ligação), escolhido aleatoriamente. É de se esperar que a existência de uma estrutura de comunidades influencie características da difusão na rede, visto que o caminhante aleatório terá tendência de permanecer na mesma comunidade, sendo essa tendência mais forte à medida que a estrutura de comunidade for mais acentuada. (3) Este trabalho explora alguns aspectos da influência da estrutura de comunidade nas características estatísticas de caminhadas aleatórias.

Palavras-chave: Redes complexas. Caminhada aleatória. Comunidades.

Referências:

1 FORTUNATO, S.; CASTELLANO, C. Community structure in graphs. In: MEYERS, B. (Ed.) **Encyclopedia of complexity and system science**. New York: Springer Verlag, 2009.p.1141-1163.

2 LANCICHINETTI, A.; FORTUNATO, S.; RADICCHI, F. Benchmark graphs for testing community detection algorithms. **Physical Review E**, v. 78, pt.2, p.046110, 2008. .

3 LANCICHINETTI, A.; FORTUNATO, S.; RADICCHI, F. /hrefhttps://sites.google.com/site/santofortunato/njp3_033015.pdf?attredirects=0Detecting the overlapping and hierarchical community structure in complex networks . **New Journal of Physics**,v.11, p.033015, 2009.doi:10.1088/1367-2630/11/3/033015.

IC12
Arquitetura de cristais em vidros

CORRADINE, I. G. [1]; HERNANDES, A. C.[2];MENDONÇA, C. R. [2];ALMEIDA, J. M. P. [2]
isadora.corradine@usp.br

[1]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

O controle espacial da cristalização em vidros através da técnica de microfabricação com laser de femtossegundos seguido de ataque químico foi feito pela primeira vez (1) no grupo de pesquisa de Fotônica do IFSC (Instituto de Física de São Carlos). Controlar a cristalização em escala micrométrica é de importância para o grupo devido às interessantes propriedades ópticas que podem ser produzidas para aplicações no ramo da óptica não linear em dispositivos fotônicos. Em contrapartida, tem-se o método tradicional de cristalização em vidros, que se dá através do tratamento térmico, o qual não permite o controle espacial das fases cristalinas. Por isso, almejando o objetivo proposto acima, vidros de $B_2O_3.Bi_2O_3.GeO_2$ (BBG) e $B_2O_3.Bi_2O_3$ (BB) foram preparados pela técnica de fusão em moldagem seguido de tratamento térmico para alívio de tensões. Vale ressaltar que a adição do Ge à composição BB deu-se em função da sua aplicação em dispositivos fotônicos dado o seu alto índice de refração, alta não-linearidade óptica de terceira ordem e elevada janela de transmissão do visível ao infravermelho. Em seguida, as amostras vítreas foram irradiadas utilizando o laser de femtossegundos operando 1 kHz, 120 fs em 775 nm. Alguns parâmetros experimentais foram investigados com o objetivo de analisar seu efeito durante a microfabricação, sendo eles: velocidades de varredura do feixe do laser – 50 e 100 μ m/s – e a energia do pulso, de 5 a 5 5 μ J. Uma etapa adicional de ataque químico foi realizada em diversas soluções aquosas, tais como KOH, H_2O, HCl, $H_2C_2O_4$, H_2O_2, HN_4OH, HNO_3 e H_3PO_4, a fim de se obter a cristalização das áreas irradiadas pelo laser. Após o processo de ataque químico, foi observada a cristalização controlada na superfície das amostras BB e BBG, e foram formadas diferentes fases de acordo com o ataque químico. Através de técnicas de caracterização de materiais como microscopia óptica e eletrônica de varredura, espectroscopia Raman e de absorção UV-VIS e a difração de raios-X, foi possível a identificação de algumas fases formadas. Este resultado demonstra que o método proposto é relevante para o controle espacial da cristalização em escala micrométrica, uma vez que é possível determinar previamente as regiões de crescimento de cristais, favorecendo assim futuras aplicações em dispositivos do gênero *lab-on-a-chip.*

Palavras-chave: Laser de femtossegundos. Vidros. Cristalização.

Referências:

ALMEIDA,J. M. P. et al. Architecture of lead oxide microcrystals in glass: a laser and etching based method. **CrystEngComm**, v. 18, n. 31, p. 5959-5964, 2016.

IC13

Estudos de estabilidade e condicionamento estrutural de telescópios de luz Čerenkov

COSTA, L. L. [1]; SPENGLER, G. [2]; SCHWANKE, U. [3]

k17k47@gmail.com

[1] Instituto de Física São Carlos - USP

[2] Humboldt-Universität zu Berlin

[3] Deutsches Elektronen Synchrotron - DESY - Humboldt-Universität zu Berlin

Prevê-se a instalação de cerca de 96 telescópios, de modelos variados, no futuro Observatório CTA (Čerenkov Telescope Array). Com isto, é importante para o desenvolvimento de novos designs e para a garantia de alta disponibilidade e boa operação dos telescópios que dados acerca de suas características, sob variadas condições, sejam coletados e estudados. Focando nos sistemas estruturais, os estudos foram direcionados ao desenvolvimento de métodos e ferramentas para análise de dados de vibração nos telescópios de médio porte (MST). Tomando como hipótese que a uma aproximação da estrutura como um sistema de elementos elásticos acoplados, frente a uma perturbação mecânica, tal sistema deve apresentar modos e frequências características de oscilação, e sua variação deve representar uma alteração estrutural, posslvelmente causada por avarias, envelhecimento de elementos estruturais ou falhas de montagem. Acelerômetros distribuídos pela estrutura podem fornecer dados temporais dos quais tais informações podem ser extraídas, com o auxílio de uma transformada de Fourier. Com tal método, ferramentas de análise foram escritas, fazendo uso da linguagem Python 3 e de métodos adicionais para suavização dos espectros de frequência calculados (1) e para detecção das frequências naturais de oscilação. (2) Para os testes, fora escrita uma ferramenta para geração de sinais semelhantes aos esperados de medidas dos acelerômetros. Concluindo, os métodos desenvolvidos são capazes de extrair os dados necessários, no entanto a ferramenta não está apta para uso, visto que problemas de implementação têm causado falhas frequentes de execução. Hipóteses para tais falhas residem na presença de alto ruído, e no uso de algoritmos de fitting sobre os espectros não-suavizados.

Palavras-chave: Monitoramento estrutural. Telescópios Čerenkov. Observatório CTA.

Referências:

1 RYAN, C. G. et al. SNIP, a statistics-sensitive background treatment for the quantitative analysis of PIXE spectra in geoscience applications. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, v. 34, n. 3, p. 396-402, 1988.

2 SILAGADZE, Z. K. A new algorithm for automatic photopeak searches. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 376, n. 3, p. 451-454, 1996.

IC14

Uso combinado de RMN de estado sólido em alto e baixo campo magnético para caracterização de mobilidade molecular de sistemas orgânicos

COSTA, R. G. L.; FILGUEIRAS, J. G.; AZEVEDO, E. R.[1]

raquel-glc@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Sólidos orgânicos como sistemas poliméricos exibem uma variedade de movimentos moleculares que têm efeitos importantes sobre propriedades mecânicas, de transporte, ópticas e estruturais. A RMN de estado sólido fornece poderosas técnicas para elucidar detalhes da dinâmica segmental e conformacional nesses materiais sólidos. (*1*) Em RMN de estado sólido em alto campo magnético, duas técnicas muito utilizadas são a combinação de polarização cruzada ^{1}H-^{13}C, desacoplamento heteronuclear de ^{1}H e rotação em torno do ângulo mágico (^{13}C CP-MAS) e a correlação de deslocamento químico com a interação dipolar ^{1}H-^{13}C (^{13}C DIPSHIFT). (*2*) Entretanto, há limitações tanto na faixa de temperatura que se pode realizar os experimentos como no tempo de execução, já que são técnicas que envolvem a aquisição de espectros de ^{13}C. Devido a essas limitações, recentemente foi proposta uma técnica de RMN no domínio do tempo, que pode ser aplicada em baixo campo magnético, que é sensível a mobilidade molecular na mesma faixa de frequência que as técnicas de ^{13}C CP-MAS, ^{13}C DIPSHIFT. Essa técnica, denominada Dipolar-Filtered Magic Sandwhich Echo (^{1}H DF-MSE) envolve aquisição de ^{1}H e, portanto, tem mais sensibilidade, podendo ser realizada mais rapidamente e cobrir maior faixa de temperatura. O objetivo deste trabalho foi discutir como técnicas de alto e baixo campo magnético combinadas podem prover informações específicas sobre mobilidade molecular e sua dependência com a temperatura. A abordagem foi demonstrada na caracterização dos processos dinâmicos presentes em uma amostra do copolímero de etileno/ácido metacrílico com grupos ácidos parcialmente neutralizados com íons de sódio, conhecido comercialmente por Surlyn©. (3) Mais especificamente, estudamos o efeito da adição de Titanado Zirconato de Chumbo (PZT) em compósitos de Surlyn©, que tem potencial aplicação como sensor de trincas. A nossa abordagem consistiu de: 1) Identificar a presença de transições dinâmicas e suas temperaturas de ativação usando a técnica ^{1}H DF-MSE. 2) Usar as técnicas ^{13}C CP-MAS e ^{13}C DIPSHIFT para identificar quais são os sítios moleculares responsáveis por cada uma dessas transições observadas. 3) Caracterizar os processos dinâmicos encontrando os tempos de correlação associados ao sistema utilizando ^{1}H DF-MSE. Como resultado, identificamos e caracterizamos a transição vítrea e a fusão da fase cristalina do Surlyn©. Comparando os resultados obtidos em amostras de compósitos de Surlyn com PZT em diferentes porcentagens, foi possível concluir que para porcentagens inferiores a 3% de PZT o material não sofre alterações em sua dinâmica molecular. Desta forma o PZT pode ser usado como forma de sensoriamento para identificação de trincas sem prejuízo de grandes alterações em propriedades intrínsecas do material. Concluindo, neste trabalho mostramos que aplicação conjunta de técnicas de RMN de estado sólido em alto e baixo campo magnético pode ser uma forma eficiente para caracterizar processos dinâmicos em polímeros, pois combina a especificidade química provida pelas técnicas de alto campo com a facilidade e versatilidade experimental das técnicas de baixo campo para caracterização da dependência desses processo com a temperatura.

Palavras-chave: Técnicas de RMN. Autorregeneração. Polímero orgânico.

Referências:

1 SCHMIDT-ROHR, K.; SPIESS, H. W. **Multidimensional solid-state NMR and polymers**. San Diego: Academic Press, 1994.

2 COBO, M. F. Intermediate motions and dipolar couplings as studied by Lee-Goldburg cross-polarization NMR: Hartmann-Hahn matching profiles. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 11, n. 32, p. 7036-7047, 2009.

3 REYNOLDS, P. J. **Surlyn© ionomer as a self-healing and self-sensing composity**. 2012. 194 f. (Masters thesis) - College of Engineering &; Physical Sciences, University of Birmingham, Birmingham, 2012.

IC15

Estudo da combinação de fotobiomodulação e terapia fotodinâmica em células de carcinoma espinocelular oral

COSTA, C. S. [1]; FARIA, C. M. G. [1]; BAGNATO, V. S. [1]

camilla.santos.costa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O Carcinoma de Células Escamosas de Cabeça e Pescoço (HNSCC) é o sétimo câncer com maior incidência mundial. Nesse cenário, destacam-se técnicas não tradicionais de tratamento como a Terapia Fotodinâmica (1) (TFD) e a Fotobiomodulação(2) (PBM). Esse projeto tem como objetivo analisar a viabilidade celular após protocolo de Fotobiomodulação seguido de Terapia Fotodinâmica, bem como investigar a captação de fotossensibilizador (PS) pela célula, após iluminação fotobiomoduladora e seu papel na eficácia da erradicação tumoral. Os experimentos são realizados com células de carcinoma epidermóide de língua humana SCC-25, inoculadas em placas de 96 poços (2 x 10^4 células/placa), cultivadas em estufa de CO_2 a 5%, a 37 °C e durante 24h para permitir a adesão celular. A técnica de Fotobiomodulação é, então, realizada com mesas iluminadoras de LED (Bio-table©) 4h antes da Terapia Fotodinâmica a fim de melhorar a resposta tumoral a TFD. São testadas doses de 5J/cm^2 de comprimentos de onda de 660 nm e 780 nm. Imediatamente após a PBM, são incubados, por 4h, 100 μ L do fotossensibilizador Photogem© a 2,5 μ g/mL em cada um poços de cada placa, que em seguida são irradiados utilizando a Bio-table© com dose de 15 J/cm^2. A viabilidade celular, por sua vez, é quantificada pelo método de MTT. Foram realizadas análises preliminares através do método de MTT e observou-se uma diminuição na viabilidade relativa dos grupos onde a PBM foi realizada com comprimento de onda de 780nm, ou seja, uma combinação de PBM-780nm e TFD parece ser mais eficiente na morte celular do que a combinação PBM-660nm e TFD. Com essas análises iniciais, a técnica unindo PBM e TFD na qual a Fotobiomodulação é realizada com 780nm aparenta ser mais promissora na erradicação tumoral. Entretanto, os experimentos devem ser repetidos para uma maior acurácia dos resultados, bem como uma análise estatística do fenômeno. Além disso, posteriormente será estudada a captação do PS pelas células através de microscopia confocal. Dessa forma, será possível determinar parâmetros que maximizem a eficácia do protocolo.

Palavras-chave: Fotobiomodulação. Terapia fotodinâmica. SCC-25.

Referências:

1 ROBERTSON, C. A; EVANS, D. H.; ABRAHMSE, H. Photodynamic therapy (PDT): a short review on cellular mechanisms and cancer research applications for PDT. **Journal of Photochemistry and Photobiology**, v. 96, n. 1, p. 1-8, July 2009.

2 HUANG, Y. Y. et al. Biphasic dose response in low level ligh therapy. **Dose Response**, v. 7, n. 4, p. 358-383, Sept. 2009.

IC16
Efeito Josephson em condensados de Bose-Einstein

doNATO, M.H. F.[1]; MUNIZ, S. R. [1]

mariohfdonato@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

À partir das analogias existentes entre os modelos teóricos de Ginzburg-Landau, para Supercondutores (SCs), e de Gross-Pitaevskii, para Condensados de Bose-Einstein (BECs), mostrar que o efeito Josephson, efeito de tunelamento em "junções túnel" bastante conhecido na literatura de supercondutividade, possui um análogo na superfluidez (corrente de número) de BECs, quando tratadas barreiras de potencial muito intensas e estreitas. Ao estudar os funcionais da energia(1), para BECs, e da energia livre de Helmholtz(2 -3), para SCs, determina-se as expressões para as densidades de correntes de número *superfluidas* ("sf") e *elétricas supercondutoras* ("sc"): . Em coordenadas cilíndricas, quando aplicadas nas proximidades da barreira de potencial , aparece a condição: , no caso de BECs, que determina o efeito Josephson quando é satisfeita:. A partir do tratamento variacional do funcional da energia para BECs, chega-se que a diferença de energia por partícula em cada lado da barreira é dado por: (1), enquanto, fenomenologicamente, em uma junção túnel, com diferença de potencial V, é dada por: (3), onde *a* e *b* determinam os pontos de início e fim da barreira, respectivamente. Além disso, a densidade de corrente de número superfluida é dada por: , enquanto a expressão da corrente elétrica no caso da junção túnel é: (3). Portanto, com base nas analogias entre SCs e BECs é possível mostrar que o efeito Josephson, geralmente associado à Supercondutividade, possui um efeito análogo com a corrente de número superfluida de BECs, o que evidencia a possibilidade de se simular tal comportamento em condensados.

Palavras-chave: Efeito Josephson. Condensado de Bose-Einstein. Supercondutividade. Superfluidez.

Referências:

1 PETHICK, C. J.; SMITH H. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

2 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. **Quantum theory of many-particle systems**. New York: Dover Publications, Inc.,2003.

3 TINKHAM, M. **Introduction to superconductivity.** 2. ed. New York: McGraw-Hill, Inc.,2004.

IC17

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

doRNELAS, J. V. [1]; CAMARGO, I. L. B. C. [1]

janaina.dornelas@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A resistência bacteriana aos antibióticos é atualmente um dos problemas de saúde pública mais relevantes a nível global, dado que apresenta consequências clínicas e econômicas preocupantes, estando associada ao uso inadequado de antibióticos. As bactérias resistentes representam o maior desafio no tratamento de infecções em hospitais devido aos diversos mecanismos de resistência aos antimicrobianos em uso clínico. Isso reforça a importância dos procedimentos de prevenção da infecção hospitalar e do uso racional dos antimicrobianos. O objetivo deste estudo foi avaliar a ação antimicrobiana de diversos compostos (extratos de plantas ou de microrganismos, peptídeos, substâncias puras, etc) em bactérias patogênicas da coleção de cultura ATCC ou de origem clínica. Independentemente de apresentar atividade antibacteriana, visou-se também avaliar a capacidade de erradicação do biofilme formado por *Staphylococcus epidermidis* ATCC 35984. Um total de 60 compostos de pesquisadores do CIBFar foram avaliados entre agosto de 2017 a julho de 2018 pelo Laboratório de Epidemiologia e Microbiologia Molecular (LEMiMo). Os compostos foram inicialmente submetidos a uma triagem, na qual foram testados em altas concentrações (512 ou 256 μ g/ml) em um representante de cada espécie bacteriana: *Staphylococcus epidermidis* ATCC 35984, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Enterococcus faecalis* ATCC 29212, *Enterococcus faecium* VRE16, *Klebsiella pneumoniae* ATCC 700603, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Acinetobacter baumannii* ACI50 e *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853. Quando alguma destas se mostrou sensível ao composto, determinou-se a CIM(Concentração Inibitória Minima e CBM(Concentração Bactericida Mínima) para as diversas linhagens clínicas daquela espécie. A capacidade de erradicação do biofilme formado por *S. epidermidis* ATCC 35984 foi testada em microplacas de poliestireno de fundo chato e em meio BHI 0,75% glicose pelo método do cristal violeta. O microrganismo foi cultivado por 24 horas a 37°C apenas com o meio de cultura e, após uma etapa de lavagem cuidadosa com solução fisiológica a 0,85% esterilizada, mais meio fresco com o composto a ser testado na concentração de 512 μ g/ml foi adicionado.(1) Após incubação das placas, a verificação da % do biofilme foi realizada comparando a absorbância do controle positivo onde não foi usado composto (100% de crescimento), com a absorbância dos poços onde foram adicionados os compostos.Dos 60 compostos, 20 (33,3%) se mostraram ativos na triagem inicial. Após a determinação da CIM e CBM foi possível verificar que a concentração de ação destes compostos era alta na maioria das vezes. Destes compostos testados, 2 foram identificados como bactericidas e 18 não tiveram sua atividade determinada, por conta da sua alta CBM. A avaliação de erradicação de biofilme requer um tempo maior para sua execução e, por isso, foram testados apenas 6 compostos até o momento. Destes 6 compostos, 5 apresentaram diminuição da biomassa do biofilme de *S. epidermidis* que variou de 60,20% a 90,64%. Destes 5 compostos, nenhum apresentou atividade antibacteriana. Desse modo, concluiu-se que cerca de 33,3% dos compostos apresentaram atividade antibacteriana, principalmente nas bactérias gram-positivas. Cinco compostos conseguiram reduzir mais que 50% do biofilmes formado e nem sempre a capacidade de redução de biofilmes estava acompanhada de atividade antibacteriana.

Palavras-chave: Testes. Compostos. Patógenos multirresistentes.

Referências:

1 CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE. **M07_A10 - Methods for dilution antimicrobial susceptibility tests for bacteria that grow aerobically**. 10th ed. Wayne,PA:2015. v. 35.

IC18

Geração e deposição controlada de nanopartículas metálicas usando a técnica de transferência induzida a laser

FERREIRA, P. R. [1]; ALMEIda, J. M. P. [1]; MENdoNÇA, C. R. [1]

paulina.ferreira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Conforme cresce a demanda por nanoestruturas e dispositivos de pequena escala, cresce também a necessidade de avanços tecnológicos neste campo. A transferência induzida a laser (LIFT, em inglês) é uma técnica de processamento de materiais que permite que sejam explorados os materiais na escala nanométrica. A aplicação desta tecnologia com pulsos de laser de largura de ps e ns permite a deposição controlada de metais e outras substâncias, como polímeros e suspensões, contudo, o LIFT de pulsos ultracurtos, da ordem de dezenas de fs, tem promovido a deposição de nanopartículas quando se processam filmes metálicos de espessura nanométrica. (1) Com tal motivação, o seguinte trabalho procura expor as investigações feitas de fs-LIFT para controlar a deposição das nanopartículas (NPs) metálicas sem a necessidade de reações químicas complexas. Os experimentos foram realizados em um laser de Ti: Al_2O_3 e filmes finos de ouro e prata, sem tratamento inicial, sobrepostos a lâminas de vidro de microscópio óptico, tal que o laser possa ser focalizado e irradiado na face descoberta da lâmina, e atingir a interface do substrato doador com filme através da lâmina. O contato do laser com o filme gera mudança no estado de agregação do material, vaporizando-o, e impelindo-o para um substrato receptor, também de vidro. A distância entre filme e receptor está entre 1 e 5 μ m. As amostras são suportadas por uma plataforma associada a estágios de translação em xy, que permitem a varredura do laser. Os parâmetros experimentais avaliados são velocidade de varredura do laser, controlada por computador, potência transmitida pelo feixe, espessura do filme e separação entre os substratos. Caracterizaram-se as nanopartículas formadas por meio de análises de espectroscopia UV-Vis e microscopias eletrônicas de varredura (MEV) e de transmissão (MET), bem como microscopia de força atômica. Os resultados apontam a formação irregular de nanoaprtículas para altas potências de laser e pequenas velocidades de varredura do laser e formação mais uniforme porém menos espessa (menor cobertura de superfície) para potências médias e altas e altas velocidades de varredura do laser.

Palavras-chave: LIFT. Nanopartículas.

Referências:

1 PIQUÈ, A.; SERRA, P (Eds.) **Laser printing of functional materials**: 3D microfabrication, eletronics and biomedicine. Weinheim: Wiley-VCH, 2018.

IC19

A sabedoria das massas: modelando o efeito da imitação de indivíduos bem-sucedidos

FERREIRA, T. [1]; FONTANARI, J. F. [2]

thiago3.ferreira@usp.br

[1]Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

O aprendizado por imitação oferece um meio pelo qual a informação pode ser transferida, seja por agentes biológicos ou computacionais (1). Sendo objeto de estudo deste trabalho o modo como a imitação de indivíduos mais bem-sucedidos interfere na capacidade de predição de um grupo de agentes computacionais, além de considerar como fatores tais como a diversidade e o tamanho do grupo afetam a precisão da previsão. Buscando estender o teorema da diversidade das estimativas (Erro coletivo quadrático = Média dos erros quadráticos individuais – Diversidade de previsão (2)) também para o âmbito computacional, o modelo em questão simula a estimativa do número de jujubas em um pote por meio de um gerador de números aleatórios. Esse procedimento é um programa computacional escrito na linguagem C que gera estimativas aleatórias em determinadas faixas de valores próximas do palpite que mais se aproximou de um dado número fixo representando a quantidade de jujubas no jarro, pré estabelecido como 751 (como em (2)). Os palpites aleatórios são gerados dentro de uma janela de valores em torno do palpite que mais se aproximou da quantidade de doces no jarro para cada rodada. Sendo assim, a cada rodada a janela em que os valores são gerados será re-centrada assim que um palpite passar a ser o mais próximo do número a ser adivinhado. Com isso, a faixa de valores pode ser variada em experimentos diferentes representando a diversidade do grupo, onde grupos mais diversos são aqueles em que os palpites mais se distanciam uns dos outros e a aleatoriedade dos palpites tenta reproduzir as variáveis de decisão de uma pessoa ao produzir um palpite em um evento como este. Com a utilização dos métodos anteriores, o erro coletivo (2), que seria a diferença entre a média dos palpites do grupo e o número a ser adivinhado, pôde ser estimado variando-se o tamanho do grupo, o tamanho da faixa de predição e o número de rodadas. Com isso, foi possível determinar uma dependência do erro coletivo com o tamanho do grupo por meio de uma lei de potências que descreve essa relação e, além disso, pôde-se observar como o aumento da janela de variação das estimativas altera essa função. Assim, foi possível verificar como agentes computacionais podem representar o modelo de predição da "sabedoria das massas"(3) por meio de aprendizagem por imitação (1). Considerando a faixa de predição como o fator que representa a diversidade do grupo, dado que quanto maior for tal janela, maior será o intervalo no qual serão geradas as estimativas individuais e, consequentemente, mais distintos serão os palpites individuais, tem-se então que ao diminuir a diversidade de um grupo, este estará mais sujeito a sofrer influência de indivíduos com "palpites ruins" tornando o rendimento do grupo inferior.

Palavras-chave: Sabedoria das massas. Aprendizado por imitação. Aprendizado de máquina.

Referências:

1 FONTANARI, J. F. Imitative learning as a connector of collective brains. **PLoS One**, v. 9, n. 10, p. e10517-1-e10517-7, 2014.

2 KING, A. J. et al. Is the true 'wisdom of the crowd' to copy successful individuals? **Biology Letters**,

v. 8, n. 2, p. 197-200, Apr. 2012.

3 GALTON, F. *Vox populi.* **Nature**, v. 75, n. 1949, p. 450-451, Mar. 1907.

IC20

Identificação de amebas de vida livre no Rio Monjolinho em São Carlos - SP

FONSECA, A. L. M. [1] ; BELLINI, N. K. [1]; THIEMANN, O. H. [1]

ana.leticia.fonseca@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Amebas de vida livre são protistas amplamente encontrados na natureza. (1) Os gêneros patogênicos trazem destaque ao grupo por estarem associados à doenças em vertebrados, normalmente infecções no Sistema Nervoso Central SNC que rapidamente levam à morte. As principais espécies patogênicas compreendem *Naegleria fowleri*, causadora da Meningoencefalite Amebiana Primária (PAM, do inglês *Primary Amoebic Meningoencephalitis*), *Balamuthia mandrillaris* associada à Encefalite Amebiana Granulomatosa (GAE, de *Granulomatous Amebic Encephalitis*) e algumas espécies do gênero *Acanthamoeba* que além de GAE provocam úlcera de córnea (AK, de *Acanthamoeba keratitis*). (2) Este projeto teve como objetivo isolar e caracterizar morfologicamente, via ferramentas moleculares e análises morfotípicas, amebas de vida livre em 5 sítios de coleta (nomeados de A a E) do rio Monjolinho em São Carlos/SP. As amostras de água coletadas foram conduzidas à análise morfotípica através do cultivo sólido (placas de NNA 1,5%) e líquido (meios Nelson e PYNFH modificado), mantidos a 26°C, 37°C e 44°C, e às análises moleculares que compreenderam desde a extração do DNA genômico ao sequenciamento. A identificação molecular de FLA foi feita utilizando primers para amplificar as regiões conservadas 18S e ITS do rDNA. Após sequenciamento dos clones positivos, realizou-se alinhamento das sequencias obtidas utilizando a plataforma BLAST, comparando-se com as sequências gênicas de rDNA de amebas de vida livre disponíveis na base de dados GenBank. Como resultado, houve a identificação de *Naegleria gruberi* no sítio de coleta D.

Palavras-chave: FLA. Free-living amoebae. São Carlos. Monjolinho.

Referências:

1 DENDANA, F. et al. Free-living amoebae (FLA): detection, morphological and molecular identification of Acanthamoeba genus in the hydraulic system of an haemodialysis unit in Tunisia. **Parasite**, v. 15, n. 2, p. 137-142, 2008.

2 REYES-BATLLE, M. et al. Isolation and molecular characterization of a Naegleria strain from a recreational water fountain in Tenerife, Canary Islands, Spain. **Acta Parasitologica,** v.62, n.2, p.265-268, 2017.

IC21

Linear and non-linear optical spectroscopic studies in perylene

GALINdo, D. D. M.[1]; de BONI, L.[1]

danyellen.galindo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The advent of ultra-short pulse lasers made possible the development of spectroscopic techniques which temporal resolutions of the order of femtoseconds allowed the study and evolution of time-resolved chemical processes, such as breaking and forming of chemical bonds, proton transfer, etc.(1) In addition, dark states not observed in linear spectroscopy can be identified using high intensity pulsed lasers with nonlinear optical techniques such as energy transfer, hydrogen bonding dynamics, and light-induced degradation on ultra-fast time scales. This project proposes the use of linear absorption and fluorescence spectroscopy and the nonlinear optical techniques, to obtain two photon absorption effects on a perylene molecule. The sample was dissolved in two different solvents, Dimethylsulfoxide (DMSO) and Water. The study of this molecule, known as possible active dye lasers, has been of great importance to understand of mechanisms involved in chemical and biological processes. As a preliminary study of the perylene photophysical properties, we obtained results describing the linear absorption, fluorescence spectrum, fluorescence quantum yields and fluorescence lifetime. For the fluorescence quantum yield, the ϕf of the perylene was determined by using Brouwers method (2), in which a sample with a known ϕf is used as reference. For the perylene in DMSO, it was found ϕ = 38% and in the water ϕ = 13%. The difference in the fluorescence quantum yields may be related with the solvent polarity. The next step of the photophysical characterization was to evaluate the fluorescence lifetime τfluo in DMSO. It was obtained through time resolved fluorescence technique, the fluorescence signal was collected by an optical fiber with a 1 mm core diameter and delivered at a Silicon fast photodetector. As the fluorescence decay time is about the same order of the detector electrical response signal, we used a convolution method to extract from the signal this value. To perform that, the response time of the detector was convoluted with a exponential decay function. The best adjustment of both curves gave τfluo = 690 ps $\pm$ 20 ps. The preliminary results helped to understand the photophysical concepts of the perylene molecule and the dependency of the relaxation dynamics of the excited state as a function of the polarity of two different solvents. The non-linear optical characterization part, that will be started, is of extreme importance in determining new compounds properties in view that no research has been found on that specific perylenic molecule.

Palavras-chave: Photophysical characterization. Convolution method. Perylene.

Referências:

1 GONÇALVES VIVAS, M.et al. Femtosecond two-photon absorption spectroscopy of poly(fluorene) derivatives containing benzoselenadiazole and benzothiadiazole. **Materials,** v.10, n.5, p.512, 2017.

2 BROUWER, A. M. Standards for photoluminescence quantumyield measurements in solution. **Pure and Applied Chemistry**, v.83, n.12, p.2217-28, 2011.

IC22

Avaliação morfo-histológica de larvas do Aedes aegypti submetidas a inativação fotodinâmica

GARBUIO, M. [1]; SOUZA, L. M. [2]; VENTURINI, F. P. [3]; INAda, N. M. [3]; BAGNATO, V. S. [3]; BLANCO, K. C. [3]

m.garbuio@hotmail.com

[1] Centro Universitário Central Paulista - UNICEP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFScar

[3] Instituto de Física de São Carlos - USP

Dengue, Chikungunya, Zika e febre amarela são doenças virais transmitidas pelo mosquito *Aedes aegypti.* A ação mais utilizada para o controle deste vetor é a aplicação de inseticidas, uma vez que vacinas ainda se encontram em fase de desenvolvimento. A curcumina (C) é um extrato natural extraído dos rizomas de *Curcuma longa L.*, com fortes propriedades bactericida, fungicida e larvicida. O sinergismo entre esse composto, luz solar e oxigênio celular desencadeia a formação de espécies reativas de oxigênio (EROs), que são capazes de oxidar diversas estruturas biológicas. O projeto tem como principal objetivo estudar e caracterizar as alterações morfo-histológicas provocadas pela C conjugada a dois açúcares (sacarose e D-manitol), bem como a contribuição da enzima catalase no metabolismo antioxidante do organismo. Neste trabalho, foram utilizadas larvas de terceiro estágio. Os grupos experimentais foram divididos em: larvas expostas a C (0,45, 1,8 e 5,4 μ g/mL) em duas condições de iluminação: luz direta e indireta (sombreado) e três grupos controle: escuro, iluminação sem a C e apenas açúcares. Após o período de tratamento, algumas larvas foram coletadas, processadas e posteriormente submetidas aos protocolos para a confecção de lâminas histológicas e outras foram utilizadas nos ensaios da atividade antioxidante da catalase (CAT). A avaliação morfo-histotológica das larvas do *Aedes aegypti* confirmou a atividade foto-larvicida da curcumina, mostrando danos significativos em todo o aparelho digestório, semelhantes aos experimentos com extrato etanólico de *Sapindus saponaria Lin.(1)* Além disso, a atividade da CAT não apresentou dados significativos à exposição a C em relação aos grupos controle.

Palavras-chave: Larvicida. Curcumina. Inativação fotodinâmica. Aedes aegypti.

Referências:

1 BARRETO, C. F. et al. Estudos das alterações morfohistológicas em larvas de *Aedes aegypti* (Diptera, Culicidae) submetidas ao extrato etanólico de *Sapindus saponaria Lin* (Sapindaceae). **Revista de Patologia Tropical**, v. 35, n.1, p.37-57, 2006.

IC23

Montagem de uma linha experimental de Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser (LIBS) com pulsos de femtossegundos

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

rafaelgarcia@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A técnica de Espectroscopia de plasma induzida por laser (LIBS) ainda hoje possui muita popularidade e potencial dentro da química analítica. Com análises rápidas, possivelmente remotas e até com a facilidade de ser portabilizada, a técnica é boa para análises em campo, sobretudo porque a amostra geralmente necessita de pouca preparação. (1-2) Além disso, é uma técnica não destrutiva e não depende de quaisquer reagentes químicos. Realizada com um laser de femtossegundos (fs-LIBS), altas taxas de ablação e densidade de energia potencializam as aplicações da técnica frente aos LIBS mais comuns feitos com nano e picossegundos. (2-3) Dada a sua importância, o presente projeto de iniciação científica tem como objetivo montar a técnica desde o começo e torná-la funcional. Será possível aprender sobre a instrumentação do laboratório e o funcionamento do laser de femtossegundos disponível. Além disso, será necessário programar um espectrômetro Ocean Optics com rotinas para aquisição de sinais, o que será feito pelo software LabView. Depois, uma fase de testes será iniciada com alguns materiais metálicos e também orgânicos, na qual se estudará a evolução temporal dos plasmas gerados e como será melhor estabelecida uma análise quantitativa dos elementos químicos das amostras, não somente qualitativa. Vai se estudar também alguns outros parâmetros físicos para a caracterização desses plasmas. Ademais, o projeto é importante para aplicações e colaborações externas futuras do grupo de fotônica.

Palavras-chave: Espectroscopia. Plasma. Laser. Femtossegundos. LIBS.

Referências:

1 SANTOS JUNIOR, D. et al. Espectrometria de emissão óptica co, plasma induzido por laser (LIBS): fundamentos, aplicações e perspectiva. **Analytica**, n. 24, p. 73-81, ago./set. 2006. Disponível em: /hrefhttps://www.ipen.br/biblioteca/2006/11498.pdfhttps://www.ipen.br/biblioteca/2006/11498.pdf.; Acesso em: 28 fev. 2018.

2 MIZIOLEK, A.; PALLESCHI, V.; SCHECHTER, I. (Eds.) **Laser induced breakdown spectroscopy**. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. doi:10.1017/CBO9780511541261.

3 GUREVICH, E. L.; HERGENRÖDER, R. Femtosecond laser-induced breakdown spectroscopy: physics, applications, and perspectives. **Applied Spectroscopy**, v. 61, n. 10, p. 233A-242A, 2007.

IC24

Estudos estruturais e funcionais da enzima NS5 RNA-dependente RNA polimerase do virus da febre amarela

GAWRILJUK, V. F. O. [1]
victor.gawriljuk@gmail.com
GODOY, A. S. [1]
OLIVA, G. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A febre amarela foi uma doença de grande risco para a saúde mundial durante os séculos XVIII à XX. Nos últimos dois anos houve um ressurgimento da febre amarela nas regiões da África subsaariana e no estado de Minas Gerais no Brasil. A principal consequência dos surtos atuais é a possibilidade de reurbanização da doença no Brasil, o que pode levar a febre amarela a ser novamente uma ameaça à saúde pública no país. Atualmente, o único método profilático da doença é a vacina de vírus atenuado 17D. (1-2) Apesar da eficiência da vacina na prevenção da doença, não existe nenhum fármaco disponível para a febre amarela até o momento. Dentre as metodologias disponíveis para a seleção de novos fármacos está o planejamento baseado na estrutura do receptor (SBDD). Com base na estrutura tridimensional de proteínas-alvo validadas, este método utiliza diversas técnicas computacionais, sempre integradas com métodos experimentais de síntese e avaliação dos compostos planejados, e tem sido cada vez mais usada para o desenvolvimento de novos fármacos. O vírus da febre amarela é um membro da família dos flavivirus, com genoma constituído por uma única fita positiva de RNA que codifica por 3 proteínas estruturais e outras 7 não estruturais. A proteína não-estrutural NS5 do vírus da febre amarela contém dois domínios que desempenham funções centrais para a replicação do RNA viral na célula infectada: um domínio tipo RNA-dependente-RNA-polimerase (RdPd) e um domínio metiltransferase. O bloqueio específico de qualquer destas funções é letal para a replicação do vírus. (3) O domínio RdRp da NS5 do vírus da febre amarela não possui estrutura cristalográfica conhecida. Neste projeto é proposta a clonagem, purificação, cristalização e possível determinação cristalográfica da estrutura do domínio RdRp da proteína NS5.

Palavras-chave: Fármacos. Febre amarela. NS5. Cristalografia. Polimerase.

Referências:

1 BONALDO, M. C et al. Genome analysis of yellow fever virus of the ongoing outbreak in brazil reveals polymorphisms. **Memorias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 112, n. 6, p. 447–451, 2017.

2 MONATH, T. P.; VASCONCELOS, P. F C. Yellow fever. **Journal of Clinical Virology**, v. 64, p. 160–173, 2015. doi: 10.1016/j.jcv.2014.08.030.

3 KLEMA,V. J.; PADMANABHAN, R.; CHOI, K. H. Flaviviral replication complex: coordination between RNA synthesis and 5'-RNA capping. **Viruses**, v. 7, n. 8, p. 4640–4656, 2015.

IC25

Construção de uma plataforma de sensores resistivos para ser utilizada na detecção de gases tóxicos

GOdoY, R. S. F. [1]; CARASCHI, L. C.[1]; MASTELARO, V. R. [1]

richard.godoy@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: O objetivo desse projeto é desenvolver uma plataforma de auto-aquecimento mais eficiente, com um sensor de gás tóxico integrado. Testes serão realizados em uma plataforma em um protótipo com o objetivo de verificar a resposta e estabilidade da plataforma em altas temperaturas (300°C) quando exposto ao gás ozônio. **Métodos e Procedimentos:** Um protótipo de sensor foi desenvolvido, contendo o sistema sensor de um lado e o sistema de aquecimento do lado oposto.(1) O substrato utilizado foi de alumina e platina foi utilizada como eletrodo interdigitado. Pelo método de RF sputtering (2), um filme de ZnO foi depositado sobre o interdigitado e foram realizados testes de aquecimento e de sensibilidade ao gás ozônio.(3) **Resultados:** Foi montada uma plataforma para testes com o sensor, dentro de uma câmara com aquecimento próprio, e testes de sensibilidade ao gás ozônio foram realizados, utilizando o aquecimento da câmara e depois o próprio aquecedor do sensor, para primeiro determinar a temperatura de trabalho e depois realizar os testes de sensibilidade. Foi observado que a melhor resposta do sensor se deu a uma temperatura de 300°C, e a máxima temperatura alcançada pelo aquecedor foi de 220°C, e houve resposta do material sensor nos dois casos.**Conclusões:** Foi possível desenvolver um protótipo de dispositivo contendo um aquecedor de um lado e um sensor do outro em um substrato de alumina que foi testado tanto no que se refere o seu aquecimento como no que se refere a sensibilidade ao gás ozônio. Na maneira que foi concebido, para atingir uma temperatura de 220 °C, foi necessário uma potência de 2,4 W, que é muito alta para os padrões de sensores de gases comerciais.

Palavras-chave: Sensores de gás semicondutores.

Referências:

1 CATTO, A. C. et al. An investigation into the influence of zinc precursor on the microstructural, photoluminescence, and gas-sensing properties of ZnO nanoparticles. **Journal Nanoparticle Research**, v. 16, n. 12, p. 2760-1-2760-9, 2014.

2 BEDOUI, S. et al. Design, simulation and optimization of a meander micro hotplate for gas sensors. **Transactions on Electrical and Electronic Materials**, v. 17, n. 4, p. 189-195, 2016.

3 ALFONSO, E.; OLAYA, J.; CUBILLO, G. Thin film growth through sputtering technique and its applications. In: ANDREETA, M. (Ed.) **Crystallization**: science and technology. London: IntechOpen, 2012. cap. 15, p. 397-432.

IC26

Investigação de algoritmos de aprendizagem de máquina aplicados ao desenho de potenciais ópticos

RAMPIM JUNIOR, A. [1]; MUNIZ, S. R. [1]

airton.rampim@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudos de simulação quântica usando átomos ultrafrios e técnicas de aprisionamento óptico baseadas em holografia digital exigem hologramas altamente precisos. Tendo em vista os processos iterativos de se obter tais hologramas usando transformadas de Fourier(1), o custo de aplicação acaba sendo considerável na maioria dos casos. Dado o grande avanço em aprendizagem de máquina nos últimos anos (2), essa ferramenta pode abrir meios mais eficientes de se calcular os hologramas se padrões forem observados. Um primeiro passo para estudar este problema é a construção de uma base de hologramas onde a armadilha correspondente é conhecida. Definimos dez armadilhas de referência e um processo de perturbação na armadilha que altera tanto a intensidade de pontos da armadilha (parâmetro de perturbação c), como na sua distribuição de pontos (parâmetro de perturbação p). Para cada armadilha perturbada calculamos o holograma usando o algoritmo Offset Mixed Region Amplitude Freedom (OMRAF) (1) que é atualmente adotado no laboratório. Para cada valor de p em (0.1%, 2.0%, 8.0%) e c em (26, 153, 255) criou-se uma base com 400 hologramas. Usando a rede neural Inception-v3 (2) realizamos o treinamento com 4000 passos em cada base, onde 80% da base corresponde a base de treinamento, 10% a base de validação e 10% a base de testes. Comparando a acurácia de cada base, notamos que para $p \leq 2.0\%$ e $p > 0.1\%$, $c > 26$ a perturbação apresentou melhor desempenho no treinamento dada a influência da perturbação na rede apresentar comportamento linear.

Palavras-chave: Armadilhas ópticas. Aprendizagem de máquina. AI.

Referências:

1 GAUNT, A. L.; HADZIBABIC, Z. Robust digital holography for ultracold atom trapping. **Scientific Reports**, v. 2, p. 721, 2012. doi: 10.1038/srep00721.

2 SZEGEDY, C. et al. Rethinking the inception architecture for computer vision.In: IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, CVPR,2016,Las Vegas,USA. **Proceedings...**. New York: IEEE, 2016.doi: 10.1109/CVPR.2016.308.

IC27
Direct Cherenkov light simulation

KARASAWA, E. G. [1]; SOUZA , V. de [1];

eliane.karasawa@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Cosmic Rays are atomic nuclei and subatomic particles highly energetics which arrives on Earth at all time. The most part is from outside the Solar System and your studies provide a better comprehension of astrophysical objects and elementary interaction of nature.Cherenkov Radiation is produced by a cosmic ray when it's enter in our atmosphere and is similar to *sonic boom* because occurs when charged particles with speed larger than *c/n* pass through a medium.The analysis of direct Cherenkov light (photons produced by the primary particle) supplies several pieces of information of the cosmic ray like energy, direction and even the kind of primary particle.(1). So, in this work, the student has developed a code in C++ capable of simulating the direct Cherenkov light, choosing the primary particle and its energy and returning a histogram with Cherenkov light intensity in function of light cone radius R on the ground.To make this possible, in this work the student also developed the evolution of refractive index of the atmosphere in function of altitude (2)using integration of isothermal thin layers. Will be presented some comparisons of this model and a full isothermal atmosphere. (1)This work is inserted in the experimental efforts of the Observatories Pierre Auger and CTA.

Palavras-chave: Cosmic rays. Cherenkov radiation.

Referências:

1 FLEISHACH, H. Measurement of the iron spectrum in cosmic rays with the VERITAS experiment. **Physical Review D**, v.98, p.022009,2017./hrefhttps://arxiv.org/ct?url=http%3A%2F%2Fdx.doi.org%2F10%252E1103%2FPhysRevD%252

2 NASA. **Earth atmosphere model:** metric units. Disponivel em:<https://www.grc.nasa.gov/www/k-12/airplane/atmosmet.html>. Acesso em: 05 set. 2018.

IC28

Busca indireta por matéria escura no centro galático com o Cherenkov Telescope Array

KHERLAKIAN, M. C. [1]; SOUZA, V. [1]

maria.kherlakian@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

É geralmente aceito hoje em dia que a densidade de matéria do Universo consiste principalmente de um componente desconhecido, chamado de Matéria Escura (ME). Também acredita-se que a ME é formada de uma nova partícula elementar neutra, estável e não-bariônica. (1) Em ambientes de alta densidade do Universo, a ME pode auto-aniquilar e produzir um alto sinal de raios gama. Entre todos os possíveis alvos, espera-se que a região do Centro Galáctico seja a fonte mais brilhante de aniquilação de ME em raios gama por várias ordens de grandeza. (2) Este projeto visa estimar a sensibilidade do futuro Telescópio Cherenkov Array (CTA) para detectar um sinal de aniquilação de ME na região do Centro Galáctico. Como esta região também possui uma forte emissão astrofísica não térmica de raios gama, uma atenção especial será dada à otimização da estratégia de observação e região de extração de sinal, a fim de aumentar a sensibilidade do CTA para um sinal de ME. O Observatório CTA começou a ser construído em 2016 e quando estiver completo (2019) possuirá 10 vezes mais sensitividade que os telescópios de raios gama atualmente em operação. (3) Nos útimos cinco anos, os pesquisadores proponentes deste projeto vem desenvolvendo modelos astrofísicos, técnicas de análise de dados, simulações e instrumentação relacionados com a física e astrofísica do CTA.

Palavras-chave: CTA. Matéria escura. ME.

Referências:

1 SWART, J. G; BERTONE, G.; van DONGEN, J. How dark matter came to matter. **Nature Astronomy**, v. 1, n. 3, p. 0059-1-0059-8, 2017.

2 BERTONE, G.; HOOPER, D.; SILK, J. Particle dark matter: evidence, candidates and constraints. **Physics Report**, v. 405, n. 5/6, p. 279-390, 2005.

3 CHERENKOV TELESCOPE ARRAY. **Science with the Cherenkov Telescope Array**. Heidelberg: CTA, 2018.

IC29

Implementação de um teste de aleatoriedade para avaliar um algoritmo de criptografica baseado em caos

LARSEN, B. P. [1]; JUSTO, M. J. M. [1]

bruno.larsen@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, criptografia é uma das melhores maneras manter a privacidade pessoal, especialmente dada a quantidade de informações enviadas pela internet. Para que a privacidade de todos os usuários possa ser mantida, os sistemas criptograficos em uso precisam ser muito bem analisados e testados. O objetivo desse projeto é estudar, e implementar, um teste de aleatoriedade novo - baseado no teste baseado na distribuição de intermitencias, desenvolvido por S. Zhu (1) - para ser usado em conjunto com testes famosos na literatura (dieharder e NIST) e se assegurar de que os sistemas criptograficos atuais são, realmente, confiaveis. Posteriormente, espera-se implementar um sistema criptografico baseado em teoria do caos, capaz de passar pelos testes com altas notas. O sistema criptografico sera baseado no deep zoom do mapa logistico que, como demonstrado por Odemir Bruno e Jeaneth Machicao, deve ser uma base solida por apresentar varias caracteristicas de aleatoriedde.(2) Para essa apresentação, apenas o teste de aleatoriedade pode ser implementado e obter resultados preliminares a tempo, devido a necessidade de fazer um codigo robusto e muito preciso, para que o sistema caotico possa ser repetido em qualquer computador, e possa ser usado para enviar dados. No entanto, os resultados preliminares parecem indicar que o teste sendo desenvolvido é mais sensivel que outros testes comuns na literatura.

Palavras-chave: Teste de aleatoriedade. Criptografia. Teoria do caos.

Referências:

1 ZHU, S. A randomness test based on the distribution of position for pre-specified pattern. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTER SCIENCE AND MECHANICAL AUTOMATION, Hangzhou, 2015. **Proceedings...** Washington, DC: CPS, 2015. p.166-169.

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

IC30

Avaliação da citotoxicidade, genotoxicidade e mutagenicidade das nanopartículas de prata em Vicia faba

LIMA, T. H. N. [1]; PEREIRA, V. A.[1]; CAIRES, A. R. L. [1]

thalita.lima212@gmail.com

[1] Instituto de Física - UFMS

A nanotecnologia é uma das áreas da ciência que tem apresentado alto crescimento, difundida em diversos setores da indústria. Por conta disso, a ascensão do uso de produtos à base de nanopartículas (NPs), em específico a utilização de nanopartículas de prata (AgNPs) que tem sido comumente utilizada como matéria-prima. (1) Paralelamente, também aumentaram-se os questionamentos sobre os efeitos de sua utilização frequente na saúde humana e no ecossistema. Desse modo, este trabalho tem como objetivo avaliar por meio de genotoxicidade ambiental os efeitos citotóxicos, genotóxicos e mutangênicos de soluções das dimensões 25 e 50 nm de AgNPs tendo como bioindicador a *Vicia faba.* Assim, foi efetuado um bionsaio padrão, no qual, plântulas de *V. faba* foram separadas em três grupos e expostas as soluções de AgNPs das respectivas dimensões de (i) 25 e (ii) 50 nm de diâmetro na concentração de 100 mg/l e ao (iii) controle em água destilada. Desse modo, realizou-se uma análise do fenômeno de divisão celular em suas diferentes fases: prófase, metáfase, anáfase e telófase em mil células para cada indivíduo analisado para cada tratamento para a determinação dos índices mitótico, de morte celular, de aberrações cromossômicas e de mutagenicidade de cada tratamento. Esses foram avaliados quanto a variação significativa pelo teste T-Student ($p \leq 0{,}05$) em relação ao controle. Dessa forma, ambas as soluções de 25 e 50 nm demonstraram potencial risco a saúde humana, especificamente a AgNPs de 50 nm genotóxica e a AgNPs de 25 nm pode ser considerada citotóxica e mutagênica, pois apresentaram diferença significativa em relação ao controle. Ademais, as AgNPs de 25 nm foram consideradas mais danosas como consequência do fato que quanto menor as NPs, maior será área superficial total interagente. Por conta disso, quanto menor as nanopartículas maior será a mobilidade e capacidade penetração das mesmas nas células.

Palavras-chave: Nanomateriais. Nanotoxicologia ambiental. Nanopartículas de prata.

Referências:

1 BRAYNER, R. The toxicological impact of nanoparticles. **Nanotoday**, v. 3, n. 1-2, p. 48-55, Feb.-Apr. 2008.

IC31
Human and nature dynamics (HANDY) model and Asabiyya

LOPES, G. M. [1]; FONTANARI, J. F. [1]

guilherme2.lopes@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

We assume that human societies can be described mathematically using population dynamics models similar to those used to model animal populations. Societies grow, decline and, sometimes, collapse. Leaving aside external factors such as natural disasters and foreign invasions, collapse may result from overexploitation of natural resources or inner social conflicts. (1) However, the general principles as well as the specific footprints associated to these two factors of collapse are not well understood yet. The HANDY (Human and Nature Dynamics) model builds on the classic Lotka-Volterra predator-prey model, where humans are seen as the predators and nature as the prey. (2) In addition, the model assumes the existence of two social classes – the elite and the commoners – and introduces the notion of wealth, which is extracted from nature by the work of the commoners. The four equations that govern the time evolution of the elite, commoners, nature and wealth reproduce many features observed in human societies, including their collapse. The concept of Asabiyya was introduced by the Tunisian Arab historian Ibn Khaldun in 1377 and it is currently associated to the notions of social solidarity, group consciousness, shared purpose and social cohesion, which Ibn Khaldun claimed to be directly related to the rise and fall of civilizations. In this work, we extend the HANDY model so as to include Asabiyya, which is modeled here as the transfer of part of the elite's wealth to the commoners in times of shortage. Our goal is to determine whether this is enough to prevent or, at least, delay the collapse of the society.

Palavras-chave: HANDY. Asabiyya. Dynamics system. Populations.

Referências:

1 DIAMOND, J. **Collapse**: how societies choose to fail or succeed. New York: Penguin Books, 2005.

2 MOTESHARREI, S.; RIVAS, J.; KALNAY, E. Human and nature dynamics (HANDY): modeling inequality and use of resources in the collapse or sustainability of societies. **Ecological Economics**, v. 101, p. 90-102, 2014. doi: 10.1016/j.ecolecon.2014.02.014.

IC32

Estimulação transcranial a laser em paciente com Acidente Vascular Encefálico (AVE)

LUCCAS, G. A. A. [1]; PAOLILLO, F. R. [1]; CASTRO NETO, J. C. [1]

giovana.luccas@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo da pesquisa é avaliar os efeitos da estimulação transcranial à laser em pacientes hemiplégicos com Acidente Vascular Encefálico (AVE). Além de realizar um estudo *ex vivo* para investigar a penetração da luz na caixa craniana e na cabeça de cadáver. Vinte pacientes hemiplégicos foram recrutados para o estudo. Os pacientes foram separados em 2 grupos [Grupo Tratado (GT) e Grupo Placebo (GP)]. Foi utilizado um cluster com 12 Lasers (660, 808 e 980 nm) para o tratamento. Para avaliar os efeitos foram realizadas a termografia (IR-CAM, Fluke,Corp., Washington, EUA) e o teste de mini-mental (avaliação do estado mental). Para o estudo da penetração da luz foi utilizado um espectroradiômetro (Ocean Optics Inc., Dunedin, FL, USA) em crânio humano e em cabeça de cadáver conservada em formol. Foi constatado o aumento significativo da temperatura (5 ± 2 ºC, $p<0.05$) na região da cabeça dos pacientes hemiplégicos. O teste mini-mental mostrou melhora na cognição dos pacientes do grupo GT, enquanto não houve diferença significativa para o GP. A penetração da luz vermelha é menor comparada ao infravermelho. Em relação à penetração do infravermelho (808nm), houve redução da intensidade de 34,8% nos tecidos cutâneo, vascular, muscular e de gordura, de 65% na caixa craniana, estimando a penetração de 0.2% na região cerebral. O aumento da temperatura na cabeça com o uso do laser indica aumento da circulação sanguínea e oxigenação para favorecer efeitos terapêuticos neurológicos, por exemplo, o aumento da função cognitiva. (1) Os valores de temperatura e a estimativa de penetração do infravermelho não geram danos teciduais nos pacientes, mostrando que a técnica é segura.

Palavras-chave: Termografia. Estimulação transcranial. Fototerapia.

Referências:

1 LAPCHAK, P. A. Transcranial near-infrared laser therapy applied to promote clinical recovery in acute and chronic neurodegenerative diseases. **Expert Review of Medical Devices**, v. 9, n. 1, p. 71-83, Jan. 2012.

IC33

Estudos estruturais e funcionais da proteína NSP2 protease de Chikungunya

MACEDO, B. M.; OLIVA, G.; GODOY, A. S. [1]

bruna.martins.macedo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O vírus Chikungunya (CHIKV) é um alphavirus transmitido por artrópodes, causador da epidêmica febre Chikungunya com sintomas variados incluindo febre, erupção cutânea e poliartrite incapacitante. Embora conhecido desde a década de 50, novas epidemias vem ocorrendo e com isso a busca por terapias antivirais. Dessa forma, a enzima protease codificada pela proteína não estrutural nsP2 constitui um alvo muito atrativo para desenvolvimento de inibidores já que é essencial para o ciclo de replicação. Neste estudo procura-se obter a proteína nsP2-protease através de sua forma recombinante expressada em Escherichia coli a partir da clonagem do fragmento de interesse e purificação da proteína, seguido por ensaios de cristalização da mesma utilizando múltiplas condições de cristalização.(1) A clonagem do fragmento de interesse foi realizada a partir do método independente de ligação (LIC) no vetor de expressão pETTrx. Nesta construção o gene que codifica a protease é precedido por uma sequência que permite a expressão da proteína fusionada a uma cauda de tioredoxina na região N-terminal. A reação de hibridização é feita em temperatura ambiente e o produto é utilizado para transformar cepas bacterianas de E. coli DH5alpha pelo método de choque-térmico. O plasmídeo foi purificado através de um kit comercial, em seguida utilizado para transformar a linhagem de expressão de E. coli C41. Foram realizados alguns ensaios: de expressão, para otimização inicial, variando a temperatura e a concentração de IPTG; e de purificação variando soluções tampão para a eluição da proteína durante a etapa de purificação. Ao final dos ensaios o resultado foi analisado através do gel de eletroforese SDS-PAGE. A cauda de tioredoxina foi removida através da atividade enzimática da TEV protease. Foram realizados ensaios de cristalização utilizando kits comerciais. Demonstrou-se a partir de análises dos géis, que concentrações crescentes, no intervalo de 0,5 - 1mM, de IPTG correspondem a melhor condição de expressão à 18ºC. Os ensaios de purificação ocorreram com êxito utilizando a resina HisTrap seguido de eluição em tampão contendo arginina e ácido glutâmico. Para a remoção da cauda de tioredoxina, verificou-se que não havia mudança no tamanho da banda observada no gel, mostrando que a proteína ainda estava fusionada com a cauda de tioredoxina demonstrando que a clivagem não foi possível utilizando a TEV. Baseados nos resultados obtidos espera-se clonar o gene em outros vetores como o pETSUMO e pETM11 para contornar o problema de remoção cauda de fusão e dessa maneira prosseguir com o projeto para outras etapas.

Palavras-chave: Alphavirus. Chikungunya. Protease.

Referências:

1 SAISAWANG, C. et al. Full length and protease domain activity of chikungunya virus nsP2 differ from other alphavirus nsP2 proteases in recognition of small peptide substrates. **Bioscience Reports**, v. 35, n. 3, p. 1-9, 2015. doi: 10.1042/bsr20150086.

IC34

Natureza topológica de instantons no espaço-tempo euclidiano

MALAVAZZI, H. [1]

henrique.malavazzi@usp.br
FERREIRA, L. A. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho consistiu em compreender as soluções que minimizam (1) a ação de Yang-MIlls no espaço-tempo euclidiano, denominadas como instantons. Iniciamos com a procura de uma solução cujo campo se anule no infinito, e ao aplicar uma transformação local (2) do grupo SU(2) sobre os campos de gauge, verificamos que a solução que procuramos está associada com um mapeamento, g, de uma hiperesfera S^3 em SU(2), portanto, a carga do instanton, é a ordem desse mapa, que a grosso modo, é o número de maneiras que podemos deformar uma hiperesfera S^3 em outra hiperesfera S^3. Verificamos que a estrutura caracterizada ao mapa g pode ser associada ao que é chamado de fibração de Hopf (3), em específico, o mapa de Hopf que parametriza uma hiperesfera S^7 em S^4, constitui uma estrutura sobre o grupo SU(2), pois, cada órbita resultante da ação de um elemento de SU(2) sobre um ponto de S^7, corresponde a um ponto de S^4. O conjunto de todas a órbitas, forma uma estrutura chamada de fibrado, cuja caracterização é definida pela ação local do grupo SU(2). Obtivemos, portanto, que a carga do instanton é a ordem do mapa entre S^3 e SU(2), e sua existência é atribuída a ação local do grupo SU(2), podendo ser descrita com o mapa de Hopf, P, que leva pontos de S^7 em S^4.

Palavras-chave: Instantons. Hopf. Hiperesfera.

Referências:

1 BELAVIN, A. et al. Pseudoparticle solutions of the Yang-Mills equations. **Physics Letters B**, v. 59 n. 1, p. 85-87, 1975.

2 ABERS, E.S.; LEE, B. W. Gauge theories. **Physics Reports**, v.9, n. 1, p. 1-141, 1973.

3 NAKAHARA, M. **Geometry and topology and physics**. 2nd ed. Boca Raton: Taylor &; Francis Group, 2003.

IC35

Projeto e fabricação de uma lente metamaterial para aprimoramento da captação de energia de ondas eletromagnética em sensores autônomos

MAREGA, G. M. [1]; PEPINO, V. M. [1]; BORGES, B-H. V. [1]

guilherme.marega@usp.br

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Nas últimas décadas, os sensores inteligentes, i. e., sistemas os quais realizam a captação, o tratamento e a transmissão de informação têm sido extensivamente utilizados desde o meio industrial aos produtos de consumo acessíveis ao grande público. A utilização desse tipo de dispositivo pode ser encontrada nas mais diversas áreas, como, por exemplo, em aplicações de sensoriamento de processos industriais, em instrumentações médicas e na domótica. No entanto, em vista das grandes restrições energéticas e físicas desses sensores, a extensão da vida útil ou o funcionamento autônomo do sensor é algo fundamental. Dessa maneira, técnicas como a ciclagem ("power duty cycled") e a recuperação de energia se tornaram populares. Fontes de energia eletromagnética estão disponíveis em grande parte do globo e em praticamente a todo instante. Assim, as fontes eletromagnéticas são fortes candidatas para aumentar a vida útil de sensores. Entre os principais desafios do uso dessas fontes, a baixa densidade energética é o principal deles. Na temática de tornar realidade a recuperação de ondas eletromagnética, este trabalho faz uso de lentes divergentes projetadas com metamateriais para aumentar a recuperação de energia de antenas receptoras para incidências além da normal. O projeto da lente baseou-se na proposta de Pepino et al. (1) de lentes em metamateriais para comunicação 5G utilizando o método semi-analítico proposto Whittaker e Culshaw. (2) A fabricação dessa lente foi realizada em uma impressora 3D utilizando o polímero Acrylonitrile butadiene styrene (ABS). Experimentalmente, a lente projetada promoveu um aumento de 58% da energia recuperada no plano azimutal.

Palavras-chave: Recuperação de energia. Microondas. Sensores. Impressão 3D.

Referências:

1 PEPINO, V. M. et al. 3D printed dielectric metasurfaces for antenna gain improvement in the Ka-band. **IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters**. doi: 10.1109/LAWP.2018.2860521. *In press*.

2 WHITTAKER, D. M.; CULSHAW, I. S. Scattering-matrix treatment of patterned multilayer photonic structures. **Physics Review B**, v. 60, n. 4, p. 2610-2618, July 1999.

IC36

Biossensores amperométricos grafite/poliuretano modificado com quitosana para a detecção de bisfenol A

MARION, S. C. F. [1]; CERVINI, P. [2]; GONÇALVES, D. [3]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. [3]

annymarion45@gmail.com

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química de São Carlos - USP

[3] Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho propõe-se o preparo de biossensores a partir do uso de eletrodos de grafite-poliuretana (GPU) e eletrodos de grafite poli-uretana modificados com quitosana e utilizando como analito o composto fenólico bisfenol A (BFA). Para a construção do biossensor utilizou-se metodologia implementada pelo Instituto de Química de São Carlos. (1) Para tanto foi feita a otimização de parâmetros da voltametria de pulso diferencial, construção da curva analítica e posterior cálculo do limite de detecção. Além disso, também estudou-se a eletrodeposição de nanoparticulas de ouro na superfície do eletrodo de GPU para detecção de BFA. Neste caso também foi feito a curva analítica e cálculo do limite de detecção, que foi compatível ao encontrado na literatura. (2) Assim, pretendeu-se contribuir para o desenvolvimento de métodos de detecção de substâncias de interesse biológico a partir de biossensores.

Palavras-chave: Biossensor. Quitosana. Bisfenol A.

Referências:

1 CALIXTO, C. M. F. et al. Development of graphite-polymer composites as electrode materials. **Materials Research**, v. 10, n. 2, p. 109-114, 2007.

2 GU, B. X. et al. Tyrosinase immobilization on ZnO nanorods for phenol detection. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 113, n. 1, p. 377-381, 2009.

IC37

Microscopia Raman confocal na análise da resposta de tumores 3D após a terapia fotodinâmica.

MARQUES, M. J. A. M. [1]; IERMAK, I. [1]; CAMPOS, C. P. [1]; INAda, N. M. [1]

maria.julia.marques@usp.br

[1]Instituto de Física São Carlos - USP

Objetivos: Avaliar os efeitos da terapia fotodinâmica em culturas 3D de tumor de mama utilizando o Microscópio Raman. Métodos e Procedimentos: Os tumores em conformação tridimensional são crescidos segundo metodologia padronizada no projeto de doutorado da aluna Carolina Campos. Será utilizado o modelo de impressão magnética (MIM), que é capaz de produzir culturas 3D em poucos dias. Esse modelo se baseia no uso de nanopartículas magnéticas e uma placa de ímã para a formação dos tumores. Aproximadamente 10 4 células serão colocadas nos poços de uma placa de 96 poços para a formação dos tumores.(1) Na realização da Terapia Fotodinâmica (TFD) o protocolo foi proposto para não causar morte completa do tumor, permitindo que haja uma formação tumoral remanescente para ser investigada. Será utilizado como fotossensibilizador o photodithazine (PDZ) incubado por 24h e como fonte de luz será utilizada uma biotable no comprimento de onda centrado em 660 nm que entregará a fluência de 1 J/cm^2 . Para analisar o tumor 3D será utilizado o Microscópio Raman Confocal WITec Alpha 300 RAS com dois lasers de trabalho (532 nm e 785 nm) e vários objetivas de aumento (com 20x, 50x, 63x e 100x). A análise do tumor é feita antes e depois da TFD. Resultados: Um teste preliminar utilizando tumores maiores do projeto já em andamento foi realizado para padronização das medidas. Foram feitas medidas do espaço intercelular onde se localiza a matriz extracelular, do interior da célula e da membrana celular. Diferenças entre os espectros obtidos foram identificadas e os perfis desses espectros estão sendo avaliados para identificação do tipo de moléculas contribuindo em cada região. Conclusão: Com esse primeiro teste espera-se identificar possíveis modificações na matriz extracelular e na conexão intercelular do tumor que sobreviveu à terapia. Assim, posteriormente será possível identificar moléculas importantes que podem gerar uma explicação de como ocorre o processo de morte e quais são os outros efeitos da TFD em tumores 3D com o uso das mudanças nos espectros Raman das células tumorais após o tratamento, para ligar diferentes picos nos espectros com diferentes organelas e moléculas celulares e explicar os mecanismos moleculares da TFD.

Palavras-chave: Microscopia Raman. Tumores 3D. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1 CAMPOS, C. P. **Avaliação da terapia fotodinâmica em tumor 3D de mama**: estudos in vitro e em membrana corioalantóica. 2017. Qualificação. Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

IC38

Rotação não linear da polarização elítpica: refração e absorção de dois fótons

MELHAdo, M. S. [1]; MISOGUTI, L. [1]

marlon.melhado@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo principal desse trabalho, nesse último período, foi estudar como discriminar as contribuições das não linearidades térmica e eletrônica. Resultados preliminares nos mostraram que realmente é possível discriminar não linearidades de diferentes origens. Foi possível observar não linearidades térmica e eletrônica numa solução de rodamina-B em metanol, utilizando a técnica de varredura-z(1) resolvida em polarização. Deixamos de lado neste último período medidas de Rotação não linear de polarização elíptica (2) para focarmos em medidas que visassem distinguir a origem das não linearidades. Na técnica de varredura-z resolvida em polarização efetuamos medidas de transmitância normalizada (Δ Tpv) em função do estado de polarização do laser: linear, elíptico e circular. Pulsos ultracurtos de 60 fs, 1 kHz de taxa de repetição sintonizados no intervalo de 600 a 680 nm foram usados nessas medidas. Observamos a existência de uma diferença na contribuição da não linearidade eletrônica e térmica conforme foi variado o comprimento de onda. Conforme aumentamos o comprimento de onda, observou-se uma tendência de diminuição da contribuição térmica, conforme era deslocado o comprimento de onda para o vermelho. Nesta condição a absorção linear tende a diminuir, diminuindo o aquecimento da solução. Ademais, em todos os comprimentos de onda, a não linearidade eletrônica prevaleceu sobre a térmica. Propomos um modelo teórico baseado em (3), em que pela razão do sinal medido com polarização linear e circular é possível quantificar individualmente a contribuição eletrônica e térmica. Os sinais de varredura-z da solução de rodamina B apresentaram não linearidades térmica e eletrônica. Por medidas realizadas com polarizações linear e circular e com o uso do modelo teórico, foi possível discriminar essas duas contribuições.

Palavras-chave: Femtossegundo. Óptica não linear. Refração não linear.

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.

2 MIGUEZ, M. L. et al. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied Physics B**, v. 120, n. 4, p. 653-658, 2015.

3 BOYD, R. W. **Nonlinear optics**. 3rd ed. Burlington: Academic Press, 2008.

IC39

Thermodynamic properties of a harmonically trapped, ultracold Bose gas

MIOTTI, M. P. [1]; FRITSCH, A. R. [1, 2]; HEMMERLING, M. [1]; BAGNATO, V. S. [1]

marcos.miotti@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Joint Quantum Institute - University of Maryland

Standard thermodynamics fails in describing non-uniform systems, such as ultracold gases trapped in a harmonic potential. In those cases, the mechanical thermodynamic variables, namely pressure and volume, cannot be defined to the whole system. Nonetheless, the global-variable method (1-2) allows one to identify two proper mechanical thermodynamic variables of a nonhomogeneous system, which are equivalent to the pressure-volume pair of uniform systems. Those proper variables, called the system's global variables, satisfy all the well-known, standard thermodynamic relations for pressure and volume. On that account, the global-variable method was employed in an experimental work on the thermodynamic properties of weakly interacting Bose gases of Rubidium-87, confined in a harmonical, magnetic trap. The gas samples were probed around their critical temperatures for Bose-Einstein condensation, below which the quantum-mechanical effects arise among the atoms. From the experiments, the equation-of-state curves around the critical temperature were determined, and they diverge from the classical, linear behavior, as expected for the Bose-condensed gas samples. Moreover, the specific heat and entropy profiles of the gas were obtained. The results show that, for a weakly interacting gas, the entropy variation to cool it below the critical temperature is lower than the value found for the non-interacting, ideal gas. As a consequence, one sees that even weak-interaction regimes affect significantly the thermodynamic properties of a Bose gas.

Palavras-chave: Ultracold atoms Bose-Einstein condensation. Thermodynamics.

Referências:

1 ROMERO-ROCHÍN, V. Equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap: the role of the "harmonic" pressure. **Physics Review Letters**, v. 94, n. 13, p. 130601-1-130601-4, 2005.

2 SANDOVAL-FIGUEROA, N.; ROMERO-ROCHÍN, V. Thermodynamics of trapped gases: generalized mechanical variables, equation of state, and heat capacity. **Physics Review E**, v. 78, n. 6, p. 061129-1-061129-10, 2008.

IC40

Preparação de células fotovoltaicas orgânicas usando solventes "verdes

MIRANda, G. S. [1]; TORRES, B. B. M. [1]; BALOGH, D. T. [1]; FARIA, R. M. [1]

guilherme.silva.miranda@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho visou-se a preparação de dispositivos fotovoltaicos orgânicos (OPVs) de heterojunção utilizando solventes alternativos aos comumente utilizados e a preparação de um protótipo de células solares utilizando o solvente que apresentou os melhores resultados. (1) Utilizou-se os solventes ciclohexanona, 2-metiltetrahidrofurano, ciclopentilmetiléter, 2-metilciclohexanona, 2-secbutilciclohexanona e 1,2-diclorobenzeno na preparação de OPVs de camada mista (P3HT:PCBM), sendo o último solvente usado como padrão de comparação com dispositivos convencionais. (2) Para a preparação dos dispositivos, foram realizados processos de fotolitografia, de deposição de camadas injetoras e de metalização de eletrodos em diferentes condições. Foram calculados os parâmetros de corrente de curto circuito (Jsc), potencial de circuito aberto (Voc), fator de preenchimento (FF) e eficiência (PCE) relativos a cada tipo de dispositivo. Preparou-se então o protótipo de células solares em série com substrato aquecido a 120°C e um suporte fixador maior no momento da deposição e, após a metalização, mediu-se a condução de corrente com o protótipo sob iluminação de lanterna. Para os solventes ciclohexanona (com substrato à temperatura ambiente) e ciclopentilmetiléter (substrato a 120°C), foram obtidos valores de PCE mais altos quando comparados ao solvente convencional: 85,3% para ciclohexanona e 56,2% para ciclopentilmetiléter. Para o protótipo de células solares, foi constatada a geração de fotocorrente, porém, as curvas apresentaram FF muito baixo e um Voc da ordem de 0,91V, valor este distante do esperado. Sendo assim, os solventes ciclohexanona e ciclopentilmetiléter despontaram como potenciais alternativas aos solventes comumente usados para a preparação de OPVs.

Palavras-chave: Eletrônica orgânica. Polímeros semicondutores. Solventes verdes. Células solares.

Referências:

1 LIANG, Y. et al. For the bright future-bulk heterojunction polymer solar cells with power conversion efficiency of 7.4%. **Advanced Energy Materials**, v. 22, n.20, p. E135-E138, 2010.

2 PARK, C.-D et al. High performance bulk-heterojunction organic solar cells fabricated with non-halogenated solvent processing. **Organic Electronics**, v. 12, n. 9, p. 1465-1470, 2011.

IC41

Terapia fotodinâmica por excitação de dois fótons em células de melanoma

NAKAda, P. J. T. [1]
paulinho.nakada@gmail.com
KURACHI, C. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, dentre os diversos tipos de cânceres diagnosticados no Brasil e no mundo, o câncer de pele é o tipo mais frequente. O melanoma é um tipo de câncer de pele que apresenta uma forma mais agressiva e um alto potencial metastático. Mesmo possuindo apenas 3 % dos casos, o melanoma causa 79 % das mortes relacionadas a este tipo de câncer de pele. As abordagens empregadas para o tratamento dessa doença são muitas vezes a resseção cirúrgica para remoção da lesão cutânea, a quimioterapia, radioterapia e imunoterapia, dependendo do estadiamento da lesão. No entanto, esses tratamentos possuem baixa eficácia em comparação aos efeitos colaterais gerados e, muitas vezes, são apenas efeitos paliativos. Um método proposto e que vem crescendo nas últimas décadas é a terapia fotodinâmica, que consiste, basicamente, na interação da luz utilizando um comprimento de onda adequado, um FS depositado na lesão e presença de oxigênio molecular para gerar espécies citotóxicas e induzir à morte celular. (1) Uma limitação encontrada para este método é a alta absorção de luz visível na superfície do melanoma, devido a sua elevada pigmentação, impossibilitando a penetração da luz no tumor e seu tratamento volumétrico. (2) Muitos estudos investigaram alternativas para contornar ou anular a elevada absorção de luz causada pela melanina através da utilização de fotossensibilizadores (FS) que atue fora da região visível e utilizando técnicas como a terapia fotodinâmica por excitação de dois-fótons (TFD-EDF). Diante disso, o foco deste projeto é avaliar a técnica de TFD-EDF em células de melanoma comparando a eficiência de dois FSs com secção de choque bem diferentes entre si. (3) A vantagem dessa técnica é a utilização de comprimentos de onda próximo ao infravermelho, onde a melanina possui uma janela terapêutica devido a sua baixa absorção, facilitando a distribuição e penetração de luz nas células melanóticas.

Palavras-chave: Melanoma. Tratamento. Fotossensibilizadores.

Referências:

1 KAROTKI, A. et al. Simultaneous two-photon excitation of photofrin in relation to photodynamic therapy. **Photochemistry and Photobiology**, v. 82, n. 2, p. 443-452, 2006.

2 HUANG, Y. et al. Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239-250, 2013.

3 KHURANA, M. et al. Biodistribution and pharmacokinetic studies of a porphyrin dimer photosensitizer (Oxdime) by fluorescence imaging and spectroscopy in mice bearing xenograft tumors. **Photochemistry and Photobiology**, v. 88, n. 6, p. 1531-1538, 2012.

IC42

Development of genosensor for plant-parasitic nematode detection

NASCIMENTO, I. S. [1]; ZUCOLOTTO, V. [1]

isabellasampaio@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Plant diseases caused by microorganisms infection are one of the main reasons of low agricultural productivity which impact in worldwide economy. The conventional diagnosis is based on visual observation of plant symptoms when the infection is in advanced stage. To avoid large crop losses, pesticides are largely used in the control of pest infestations. (1) However, its indiscriminate use can cause serious health problems and render microorganisms resistant to these compounds. Therefore, the development of an accurate method to detect and identify plant pathogens in crop environment is highly desirable to avoid unspecific and excessive use of pesticides. (2) We propose a sensitive and selective point-of-care electrochemical genosensor to identify four economically relevant plant pathogens. Disposable electrodes were fabricated by gold layer deposition on PET substrates using sputtering technique and characterized by atomic force microscopy (AFM). To detect target DNA sequences through hybridization, thiolated-capture probes (CP) were immobilized on electrode surface by Au-S bonds. Electrochemical changes in a ferrocyanide/ferricyanide redox solution were monitored using cyclic voltammetry (CV) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS) techniques. Our results showed that this biosensor offers a promising strategy for plant pathogen sensing as a rapid, sensitive and low-cost technology that can decrease the crop losses and the use of pesticides.

Palavras-chave: Electrochemical genosensor. Plant pathogen detection.

Referências:

1 ABAD, P. et al. Genome sequence of the metazoan plant-parasitic nematode *Meloidogyne incognita*. **Nature Biotechnology**, v. 26, n. 8, p. 909-915, Aug. 2008.

2 KHATER, M.; de la ESCOSURA-MUÑIZ, A.; MERKOCI, A. Biosensors for plant pathogen detection. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 93, p. 72-86, July 2017. doi: 10.1016/j.bios.2016.09.091.

IC43

Um modelo estocástico de crescimento populacional com limitação de recursos

NEVES, L. R. T. [1]
rodrigoneves@usp.br
MAIA, L. P. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Na atualidade, grande parte da modelagem matemática em dinâmica populacional é feita por meio de processos estocásticos. Mais especificamente, modelos baseados em indivíduos (IBMs, na sigla em inglês) envolvem o estabelecimento de regras - em geral probabilísticas - que regem o nascimento e a morte dos indivíduos, de modo que o comportamento coletivo da população é consequência da implementação global destas regras. (1) Neste trabalho, apresentamos um IBM estocástico de crescimento populacional de uma única espécie, em que há competição intraespecífica em decorrência da limitação de alimento disponível no meio. A alimentação é modelada a partir da introdução de uma distinção dinâmica no tempo de vida restante a cada indivíduo, e a reprodução é assexuada, a uma taxa individual fixa. As regras específicas de comportamento individual são relativamente simples e simulações numéricas mostram que o modelo produz o comportamento coletivo esperado, com um estado de equilíbrio em torno do qual se observam flutuações estocásticas. Matematicamente, a dinâmica se caracteriza como um processo markoviano de tempo discreto. Ainda nas etapas iniciais do estudo, já foi possível derivar alguns resultados analíticos, em particular a dependência entre os parâmetros ajustáveis e o tamanho da população no equilíbrio, concordando com as simulações. Assim, há a expectativa de que seja possível reproduzir o comportamento logístico, sob certos limites. Nossa abordagem parece suficientemente distinta de outras propostas encontradas na literatura para motivar investigações mais profundas. (1-2) Nosso objetivo é prosseguir no estudo analítico do modelo, sem, no entanto, abrir mão de simulações computacionais como ferramenta auxiliar de investigação.

Palavras-chave: Dinâmica de populações. Modelagem estocástica. Equação logística.

Referências:

1 TKACHENKO, N. et al. Individual-based modelling of population growth and diffusion in discrete time. **PLoS ONE**, v. 12, n. 4, p. e0176101, 2017.

2 McKANE, A. J.; NEWMAN. T. J. Stochastic models in population biology and their deterministic analogs. **Physical Review E**, v. 70, n. 4, p. 041902, 2004.

IC44

A sabedoria das massas: o efeito da distribuição das estimativas individuais

NOBRE, D. A. [1]; FONTANARI, J. F. [1]

davi.nobre@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O conceito de sabedoria das massas foi introduzido pela primeira vez em 1906 por Francis Galton (1), que analisou diversos palpites sobre o peso de um boi e verificou que a mediana dos valores acertava com bastante precisão o valor real. Esse fenômeno ocorre quando a estimativa do grupo é mais acurada que as estimativas individuais, e aparece em variadas situações do cotidiano. (1-2) É intuitivo imaginar que, sempre que há um parâmetro a ser estimado, a média dos palpites de um grupo é tão mais próxima do valor real do parâmetro quão maior é o grupo, o que, contudo, não é necessariamente verdadeiro. O modelo adotado para a tomada de decisão do palpite prevê um erro sistemático para a média das estimativas de um grupo em que estas são realizadas de forma não enviesada. (3) Para testar o modelo, foram feitos quatro experimentos com diferentes parâmetros a serem determinados: a quantidade de jujubas em um pote, o peso de um pote de feijão, a quantidade de páginas de um livro e o comprimento de uma fita de papel. Os resultados obtidos reforçam a validade do modelo adotado, ainda que este seja aproximado, mas evidenciam a possibilidade de possíveis melhoras para a previsão da distribuição dos palpites individuais.

Palavras-chave: Inteligência coletiva. Sistema de agentes. Palpites não enviesados.

Referências:

1 SUROWIECKI, J. **The wisdom of crowds**: why the many are smarter than the few and how collective wisdom shapes business, economies, societies, and nations. New York: Anchor Books, 2005.

2 MAUBOUSSIN, M. J. Explaining the wisdom of crowds: applying the logic of diversity. **Mauboussin on Strategy**, Mar. 2007.Disponível em: <http://trendfollowing.com/whitepaper/ExplainingWisdom.pdf>. Acesso em: 30 ago. 2018.

3 NASH, U. W. The curious anomaly of skewed judgment distributions and systematic error in the wisdom of crowds. **PLoS One**, v. 9, n. 11, p. e112386-1-e112386-17, Nov. 2014.

IC45

Determinação da energia de limiar para fabricação com pulsos de femtossegundos

NOLASCO, L. K. [1]; MENdoNÇA, C. R. [1]; ALMEIda, G. F. B. [1]

lucas.konaka.nolasco@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho foi aplicar a técnica de D-Scan (1) para determinar a intensidade de limiar para microfabricação com pulsos ultracurtos em materiais absorvedores e transparentes, implementando desde sua montagem ópto-mecânica até o interfaceamento com o computador. O sistema utilizado para microfabricação conta com um laser de Ti: Safira centrado em 800 nm que produz pulsos de 50 fs numa taxa de repetição de 5 MHz, além de estágios de translação motorizados que movimentam a amostra com resolução sub-micrométrica. Na parte final do projeto, utilizou-se um laser de Ti: Safira amplificado, centrado em 775 nm, a uma taxa de repetição de 1 KHz, que produz pulsos de 150 fs. O método de D-Scan consiste em varrer a amostra na diagonal (feito através de um programa desenvolvido), na direção de incidência do laser pulsado, de tal forma que cada posição da amostra é exposta a uma cintura distinta do feixe. Com isso, forma-se um padrão característico do método na superfície do material, o qual tem sua altura medida através de um microscópio. Através desta medida, calcula-se a intensidade de limiar da amostra, que pode ser convertida em fluência. Na parte inicial do projeto, o método D-Scan foi testado usando como amostra um filme fino de silício amorfo hidrogenado (aSi: H), dada sua alta absorção em 800nm. O valor de intensidade de limiar foi It(D-Scan) = (1,5 $\pm$ 0,3).10^{16} W/m^2. Numa segunda etapa, foram utilizados amostras de materiais mais conhecidos, para comparação com a literatura, como o bulk de silício e um filme fino de ouro e, por fim, o BK7 como exemplo de material transparente. Foram calculados, então, seus valores de fluência [J/cm^2]: F(Si) = (0,23 $\pm$ 0,03), F(Au) = (0,29 $\pm$ 0,03), F(BK7) = (1,8 $\pm$ 0,3). Comparando com a literatura (2-3) os valores obtidos do Si e Au foram equivalentes. É seguro dizer que o método implementado foi um sucesso. Ele consegue abranger materiais de características ópticas variadas e permite o cálculo da fluência de limiar de uma maneira rápida e eficiente, necessitando de poucas medidas para um valor satisfatório.

Palavras-chave: Pulsos de femtossegundos. Microfabricação. Óptica.

Referências:

1 SAMAD, R. E; VIEIRA JUNIOR, N. D. Geometrical method for determining the surface damage threshold for femtosecond laser pulses. **Nonlinear Optics and Spectroscopy**, v. 16, n.2, p. 336-339, 2016.

2 BONSE, J. et al. Femtosecond laser ablation of silicon: modification thresholds and morphology. **Applied Physics A**, v. 74, n. 1, p. 19-25, 2002.

3 KRUEGER, J. et al. Femtosecond laser-induced damage of gold films. **Applied Surface Science**, v. 253, n. 19, p. 7815-7819, 2007.

IC46

Estudos estruturais e funcionais do complexo NS2B-NS3 protease do vírus da febre amarela

NOSKE, G. D. [1]; GOdoY, A. S. [1]; OLIVA, G. [1]

gabriela.noske@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O vírus da febre amarela tem genoma composto por uma única fita de RNA e pertence ao gênero flavivírus, que inclui dengue, zika e hepatite C. Apesar do histórico da doença, ainda não existe nenhum medicamento para seu tratamento. O genoma viral codifica uma única poli proteína que contém três proteínas estruturais e sete não estruturais. A NS3 tem dois domínios: um domínio protease e um domínio helicase/NTP-ase. A NS3 protease age juntamente com uma outra proteína não estrutural como cofator, a NS2B, que auxilia o enovelamento correto da NS3 protease e permite que tenha uma forma ativa. O complexo NS2B-NS3 protease cliva a poli proteína imatura, liberando as proteínas formadoras do complexo de replicação viral. Considerando o importante papel desta proteína na replicação viral, o objetivo deste projeto consiste em realizar a clonagem do gene que codifica a proteína de interesse, seguido de sua expressão e purificação, a fim de obter sua estrutura cristalográfica para proposição de possíveis inibidores para a enzima. Inicialmente, amplificamos a região codificante da proteína NS2B-NS3 protease utilizando como molde o cDNA viral, gentilmente cedido pela Dra. Myrna Bonaldo (Fiocruz). (1) A sequência amplificada foi clonada no vetor de expressão pETSUMO pelo método de clonagem independente de ligação (LIC). Os plasmídeos obtidos foram amplificados para inserção de um linker (G_4SG_4) entre o cofator NS2B e o domínio protease. Os resultados da clonagem foram analisados por eletroforese em gel de agarose e sequenciamento. Ao final, os plasmídeos foram utilizados para transformar a linhagem de expressão Rosetta 2. Foram realizados testes de expressão com variação da concentração de IPTG e temperatura a fim de otimizarmos a expressão da proteína recombinante. A purificação foi realizada em uma coluna de afinidade HisTrap e a proteína de interesse foi eluida com gradiente de imidazol. A cauda de fusão SUMO foi removida durante a diálise, na presença de TEV protease. Os resultados foram analisados por SDS-Page e Western Blot. Por fim foram realizados testes de cristalização utilizando kits comerciais. A fim de avaliarmos a atividade da proteína foi realizado um ensaio baseado na fluorescência do AMC liberado pela atividade proteolítica da enzima na presença do substrato Bz-nKRR-AMC. (2) O resultado da clonagem foi analisado por eletroforese em gel de agarose e sequenciamento, a partir dos quais foi possível verificar a presença do gene de interesse. Para os testes de expressão, a análise foi feita utilizando Western Blot, a partir do qual a Rosetta 2 foi selecionada como melhor linhagem de expressão. No mesmo ensaio, definimos a melhor temperatura e concentração de IPTG para expressão da proteína. Através da técnica de SDS-Page observamos que foi possível obter proteína pura, a qual foi utilizada para testes iniciais de cristalização. Por fim, os resultados do ensaio de atividade indicam que a proteína se encontra ativa. Até agora, realizamos a clonagem do gene codificante da proteína NS2B-NS3 protease, assim como fomos capazes de obter uma expressão solúvel e a proteína pura e em sua forma ativa.

Palavras-chave: Febre amarela. Protease. Cristalografia.

Referências:

1 BONALDO, M. C. et al. Genome analysis of yellow fever virus of the ongoing outbreak in Brazil reveals

polymorphisms. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 112, n. 6, p. 447-451, jun. 2017.

2 LI, Y. et al. Structural insights into the inhibition of Zika virus NS2B-NS3 protease by a small-molecule inhibitor. **Structure**, v. 26, n. 4, p. 555-564.e3, Apr. 2018.

IC47
Fontes locais de raios cósmicos ultra-energéticos

OLIVEIRA, C. [1]
caina.oliveira@usp.br
SOUZA, V. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A produção de partículas energéticas no Universo continua sendo um dos grandes mistérios da ciência moderna. Os mecanismos de aceleração de partículas em fontes astrofísicas são ainda desconhecidos e resultados recentes apontam para a necessidade de uma abordagem multi-mensageiro para resolver este problema. (1) Neste projeto, explora-se a necessidade de uma fonte local de raios cósmicos de altas energias para descrever os dados medidos pelos observatórios de raios cósmicos. Foca-se em modelos teóricos de propagação de prótons ultra-energéticos (HEP) em um meio extragaláctico preenchido por radiação cósmica de fundo de microondas (CMB), a fim de obter o fluxo de prótons atingindo a Terra. (2-3) Para isso, utilizou-se métodos numéricos no software ROOT para calcular a taxa de atenuação devido à perdas adiabáticas, produção de pares e fotoprodução de píons por interações com a CMB. (1-3) Usando a taxa de atenuação, calculou-se a distância de perda de energia e o espectro atenuado para diversas distâncias de propagação, supondo fontes com índice espectral 2 e um cutoff exponencial em $10^{21,5}$ eV (2-3) Os resultados obtidos indicam que o fluxo de prótons na Terra com energias acima de $10^{19,5}$ eV só recebe contribuições de fontes com distância menor que 200 Mpc devido à mudanças dramáticas no espectro que ocorre devido à atenuação.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Fontes locais. Propagação extragaláctica.

Referências:

1 ANJOS, R. C. **Propagação de raios cósmicos extragaláticos**. 2014. 211 p. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

2 STANEV, T. **High energy cosmic rays**. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 2010. (Astronomy and planetary sciences).

3 TAYLOR, A.; DE CASTRO, A.; CASTILLO-RUIZ, E. **Ultra high energy cosmic ray, neutrino, and photon propagation and the multi-messenger approach**. 2009. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/0902.3012.pdf>. Acesso em: 10 ago. 2018.

IC48

Uso de visão computacional para reconhecimento de rachaduras

KÜHL, K. F. [1]; CASTRO NETO, J. C. [1]; YASUOKA, F. M. M. [1]

kevin_kuhl@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é desenvolver um sistema capaz de reconhecer rachaduras em superfícies, utilizando fundamentos da visão computacional. Converteu-se o espaço de cores da imagem original para escala de cinza. Posteriormente, aplicou-se filtro para redução de ruídos, utilizando o algoritmo Non-Local Means descrito quantitativamente pela equação $u(p) = \frac{1}{C(p)} \int_\Omega v(q) f(p,q) dq$u(p)=C(p)1$\int$ Ω)v(q)f(p,q)dq. (2) Onde p e q representam pontos na imagem (espaço Ω), u(p) é o valor filtrado da intensidade no ponto p, v(p) é o valor da intensidade no ponto q (não filtrado), C(p) é uma função de normalização e f(q,p) é a função peso, sendo utilizado o modelo de função Gaussiana. O filtro escolhido preserva proporções e posições referentes à imagem original. A imagem filtrada foi submetida, então, ao processo de binarização inversa com limiar adaptativo baseado em uma correlação cruzada com uma função janela Gaussiana. Finalmente, para reduzir os pontos de ruído presentes na imagem binarizada, aplicou-se filtro morfológico de erosão descrito por $(f \ominus b)(x) = inf_{y \in B}[f(x+y) - b(y)](f \ominus b)(x) = infy \in B[f(x+y) - b(y)]$. (1) Onde inf representa o ínfimo do conjunto descrito entre colchetes, f(x) é a intensidade dos pontos da imagem, b(x) é o elemento estruturante (ou kernel da erosão) e B é o espaço no qual b(x) é definido. O resultado final obtido é satisfatório, uma vez que foi possível, para o computador, distinguir a rachadura do restante da superfície. Outras técnicas de iluminação, filtragem e outros espaços de cores estão em estudo, de forma a reduzir ruídos e aumentar a confiabilidade do método.

Palavras-chave: Visão computacional. Processamento de imagens. Filtros.

Referências:

1 BRADSKI, Gary; KAEHLER, Adrian. **Learning OpenCV 3** : Computer Vision in C++ with the OpenCV Library. 1. ed. United States Of America: O'Reilly Media, 2008. 580 p.

2 A. Buades, B. Coll, J. -. Morel, "**A non-local algorithm for image denoising**", 2005 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR'05), San Diego, CA, USA, 2005, pp. 60-65 vol. 2.

IC49

Desenvolvimento de imunossensores flexíveis para a detecção de cortisol salivar

GABRIEL-PEREIRA, F. [1]; RAYMUNdo-PEREIRA, P. A. [1]; OLIVEIRA J., O. N. [1]

felipe.gabriel.pereira@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos:Com os avanços da biotecnologia muitos biomarcadores têm sido mapeados e catalogados, abrindo uma importante janela para a compreensão da gênese e prevenção de doenças. Para responder a esse cenário, torna-se fundamental que esses novos marcadores possam ser devidamente identificados. É nesse contexto que o uso de dispositivos com alta performance de detecção tem se mostrado uma ferramenta valorosa, especialmente na área de confecção de biossensores. (1) Este trabalho mostra uma estratégia simples e eficiente para a confecção de um imunossensor flexível para detecção de cortisol em amostras de saliva.Métodos e Procedimentos:A confecção do imunossensor foi realizada através da formação de uma monocamada automontada (SAM) utilizando o alcanaotiol ácido mercapto acético por 2 h sobre um dispositivo flexível contendo um arranjo de eletrodos, seguido da imobilização do anticorpo anti-cortisol por 1 h na superfície através de ligações covalentes com auxilio de cloridrato de N-(3-dimetilaminopropil)-N′-etilcarbodiimida e N-Hidroxissuccinimida (EDC/NHS). A proteína soro bovino albumina foi utilizada para bloquear sítios ativos da SAM. O cortisol foi adsorvido espontaneamente na superfície do imunossensor por 20 min. A técnica espectroscopia de impedância eletroquímica foi utilizada para o monitoramento da variação do sinal analítico em função do aumento de moléculas de cortisol adsorvidas a superfície do imunossensor.Resultados:Nossos resultados apontam um aumento gradual da resistência de transferência de carga (Rct) de acordo com o aumento da concentração de cortisol adsorvido no imunossensor em uma faixa de concentração entre 1,0 x 10–12 e 1,0 x 10–6 g mL–1 com um limite de detecção de 1,0 x 10-12 g ml -1.O aumento gradual do sinal eletroquímico foi proporcional ao aumento da concentração do cortisol e o sucesso na obtenção de uma curva analítica, indicam que a arquitetura do sensor é funcional (2) e apontam no sentido da validação.

Palavras-chave: Biosensores. Imunossensores. Cortisol salivar.

Referências:

1 SASYA, M. et al. Nanotechnology-based electrochemical detection strategies for hypertension markers. **Biosensors and Bioelectronics**,v.116, p.67-80, 2018.doi: 10.1016/j.bios.2018.05.034

2 BANICA, F. **Chemical sensors and biosensors** : fundamentals and applications. Chichester, Wiley, 2012. 541 p.

IC50

Aplicação da fluorescência da clorofila para determinar as alterações no status fisiológico da Vicia faba induzido por nanopartículas de prata

PEREIRA, V. A. [1]; CAIRES, A. R. L. [1]

vitoriaifms@gmail.com

[1] Instituto de Física - UFMS

Nos últimos anos, as pesquisas em materiais nanoestruturados proporcionaram um grande avanço tecnológico em diversas áreas tais como medicina, farmacêutica, cosmética, têxtil, automobilística, agrícola, entre outras. (1) Entretanto, as atuais pesquisas sobre o uso desses materiais ainda suscitam dúvidas sobre seus possíveis benefícios ou malefícios à saúde humana e ao ecossistema. (2) Dessa forma, objetivou-se, através deste trabalho, utilizar a espectroscopia de fluorescência para identificar as alterações nos processos fotossintéticos da *Vicia faba* induzidas por nanopartículas de prata (AgNPs). Fez-se um experimento, onde 12 plântulas foram expostas, proporcionalmente, aos 3 tamanhos de AgNPs: 25 nm, 50 nm, 75 nm e ao grupo controle, com água destilada. O processo experimental foi dividido em etapas: o preparo do modelo vegetal, o preparo das soluções contendo as AgNPs, a exposição ao agente, a espectroscopia de fluorescência e a análise estatística. Dessa forma, a eficiência de funcionamento do PSII foi avaliada por meio da análise do parâmetro $Qy_{máximo}$, enquanto a dissipação não-fotoquímica pôde ser avaliada por *NPQ* e *qN*. As alterações observadas nos parâmetros permitiram concluir que as NPs induzem alterações nos processos fotossintéticos da *Vicia faba*, de modo que a parcela de energia que deveria ser utilizada de forma fotoquímica e fluorescência, acaba sendo dissipada em forma de calor. Os resultados sugerem que isso se dá pelo fato de que parte dos elétrons fotoexcitados da clorofila podem ser transferidos para as superfícies das AgNPs, reduzindo a eficiência do processo de fotossíntese. (3)

Palavras-chave: Nanopartículas. Vicia faba. Espectroscopia de fluorescência.

Referências:

1 ZHANG, W. X.; KARN, B. Nanoscale environmental science and technology: challenges and opportunities. **Environmental Science and Technology**, v. 39, n. 5, p. 94A-95A, 2005.

2 SCHULZ, P. A. B. **A encruzilhada da nanotecnologia**: inovação, tecnologia e riscos. Rio de Janeiro: Vieira &; Lent, 2009. 128 p.

3 BARAZZOUK, S.; KAMAT, P. V.; HOTCHANDANI, S. Photoinduced electron transfer between chlorophyll a and gold nanoparticles. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 109, n. 2, p. 716-723, 2005.

IC51

Desenvolvimento e desenvolvimento de um simulador para imagens e espectroscopia por ressonância magnética

PESSOA, V. H. M. [1]; PIZETTA, D. C.[1]; PAIVA, F. F. [1]

victor.pessoa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A ressonância magnética é um campo de pesquisa que apresenta grande interesse, desde a ciência básica a suas aplicações tecnológicas. No entanto, seu aprendizado no meio acadêmico é dificultado pelo alto custo daaparelhagem requerida. Por este motivo, a criação de um simulador que permita a execução de um experimento de RM do início ao fim é justificada, tendo em vista que os simuladores desenvolvidos até então são pouco flexíveis ou limitados a uma etapa de um experimento real, como o desenvolvido pelo PhET (1) ou o Bloch Simulator. (2) Foi desenvolvida uma ferramenta, chamada MR SPRINT (3), implementada em Python 3.4, utilizando diversas bibliotecas, sejam de uso científico ou responsáveis pela interface gráfica, além de contar com armazenamento de dados em formato HDF5. O desenvolvimento do projeto utilizou o repositório GitLab, onde estão disponíveis os arquivos e o histórico de melhoramentos. A ferramenta MR SPRINT apresenta uma interface gráfica que integra cinco módulos que facultam a interação com o usuário mais uma central de controle de parâmetros. Ao percorrer o uso dos módulos, o usuário é capaz de criar e editar uma amostra, configurar o sistema físico, selecionar uma sequência de pulsos de radiofrequência e/ou gradientes de campo magnético, simular e observar a dinâmica temporal da magnetização da amostra e analisar os dados coletados na simulação.

Palavras-chave: Simulador. Ressonância magnética. Imagens.

Referências:

1 UNIVERSITY OF COLORADO BOULDER. PhET Interactive Simulations. **Simplified MRI**. Disponível em: <https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/mri>. Acesso em: 15 set. 2017.

2 DANISH RESEARCH CENTRE FOR MAGNETIC RESONANCE. **Bloch simulation for education in MRI and NMR**. Disponível em: <http://www.drcmr.dk/bloch>. Acesso em: 15 set. 2017.

3 PIZZETA, D. C.; PESSOA, V. H. M. **Welcome to MR SPRINT's documentation!** Disponível em: <https://mrsprint.readthedocs.io>. Acesso em: 15 set. 2017.

IC52

Studies of SEPT2-SEPT6 heterocomplex: revealing the molecular determinants involved in the interaction

ROSA, H. V. D. [1]; LEONARdo, D. A [1]; GARRAT, R. C. [1]; ARAÚJO, A. P. U. [1]

higor.rosa@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Objectives Septins are proteins that bind and / or hydrolyze GTP, interacting with each other forming filaments, which play a significant role in several cellular functions such as membrane remodeling, compartmentalization and division. Many studies have already been performed to understand the filament assembly. However, the only heterocomplex structuraly characterized, formed by human septins 2-6-7, presents low resolution (4 Å), which does not allow a detailed analysis of its structure, crucial for understand the filament assembly. In this sense, we have analyzed the interaction between the GTP binding domains (G domains) of the septin 2-6 complex (SEPT6G-SEPT2G), as well as alternatives constructions in order to understand the molecular determinants of this interaction. Materials and Methods The heterocomplex was co-expressed in E. coli and copurified by immobilized metal affinity chromatography (IMAC) and size exclusion chromatography (SEC). The crystals were obtained by the vapour diffusion method. The diffraction patterns of the crystals were collected, self-processed on the I24 line at Diamond Light Source (UK) and the phases were determined via molecular replacement. The model was refined and validated. Other heterocomplexes containing other SEPT2 regions (N and / or C-terminus) were analysed in solution, in order to verify their influence in the oligomeric state and thermal stability of the complex. These parameters were measured using SEC coupled to a multi-angle light scattering (SEC-MALS) and differential scanning calorimetry (DSC), respectively. Results The SEPT6G/SEPT2G complex was coexpressed and copurified as a heterodimer in solution, which was also observed in the asymmetric unit of the structure obtained at 2.6 Å. When we analyzed the structure and aligned it with the (respective) chains present in the structure previously characterized, it was possible to visualize many important regions (not only at the interface of interaction) that were not observed even in structures of greater resolution of individual septins, due to their great flexibility. In addition, from the new structure, an important structural motif was observed, which could be directly related to the loss of catalytic activity of the septin 6. In the analysis of new constructs of SEPT2G, adding the other domains, we verified that they did not alter the oligomerization state of the heterocomplex, causing only a small reduction on the thermal stability. On the other hand, the absence of SEPT2G as a partner of SEPT6G (to form the heterocomplex) led to the a significant loss in the thermal stability (20 ºC) of the latter. Conclusions The knowledge of the structure of the SEPT6G-SEPT2G complex brought important details about the molecular interactions of G interface, supporting its higher thermal stability when compared to the individual septins. Furthermore, the structure allowed identifying the reasons for the lack of activity in SEPT6.

Palavras-chave: Septins. Crystallography. Molecular biophysics. Protein-protein interaction.

Referências:

1 SIRAJUDDIN et al. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

IC53

Análise estrutural de mutações do receptor de andrógeno humano: cálculos de energia livre e correlação com achados clínicos

TANIMOTO, C. [1]; NASCIMENTO, A. S. [1]

camila.tanimoto.rodrigues@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A proteína receptora de andrógenos atua como modulador da transcrição gênica, é ativada por ligantes – os hormônios andrógenos – e tem papel importante no desenvolvimento e manutenção do fenótipo do sistema reprodutor masculino. Mutações neste receptor são relacionadas com diversas patologias, como câncer no sistema reprodutor masculino e a síndrome de insensibilidade a andrógenos, que corresponde a baixa ou nula resposta celular à hormônios andrógenos. (1) A interação entre uma proteína e seu ligante ocorre de forma precisa e controlada no sítio de ligação e mesmo pequenas modificações estruturais em uma proteína podem alterar a afinidade de interação com o ligante, alterando a energia de ligação. A estimativa da energia de ligação não é um processo trivial, para o qual muitos métodos computacionais vêm sido desenvolvidos. Utilizando um software em desenvolvimento no grupo de Biotecnologia Molecular do IFSC/USP, o LIBELA (2), buscou-se neste trabalho utilizar simulações de Monte Carlo para estimar energias de ligação com a finalidade de estabelecer um meio de predição a mutações ainda não identificadas, interpretação molecular e estrutural de mutações ocorridas e validação do método utilizado. A partir de um conjunto de dados composto por mutantes do receptor de andrógenos, foi analisada a correlação entre as energias calculadas e experimentais, indicando uma separação dos mutantes que não interagiam daqueles que interagiam com o ligante. Os gráficos de energia em função do RMSD do conjunto analisado confirmaram a proposta de um funil para a superfície de energia de interação. Modelos diferentes foram aplicados às simulações – uma correção para o efeito do solvente e o modelo energético de Poisson-Boltzmann, confirmando o perfil obtido. A aplicação de uma análise qualitativa ao invés de quantitativa se apresentou como alternativa aplicável do método, abrindo caminho para o estudo no contexto de engenharia de proteínas, como a reversão de afinidade de uma enzima por seus cofatores. Neste contexto, uma nova aplicação foi proposta utilizando uma oxirredutase com cofator preferencial sendo o NADP. Foram criados diversos mutantes através de mutações específicas na estrutura da proteína com o objetivo de converter a afinidade para NAD como cofator preferencial. A análise de cálculos de *docking* molecular com NAD e com NADP indicou os mutantes com os perfis desejados a serem utilizados no emprego do método. A partir dos cálculos com simulações de Monte Carlo, a análise das energias em função do RMSD para dois mutantes selecionadas indicou interação preferencial com NAD em relação ao NADP. Pode-se concluir que o método utilizado possui resolução limitada, mas consegue separar mutantes que se ligam dos que não se ligam. A aplicação da análise qualitativa se mostrou eficaz, obtendo-se um mutante candidato que demonstrou ter alcançado a reversão de afinidade de cofator.

Palavras-chave: AR. Receptor nuclear. Interação molecular.

Referências:

1 BROWN, T. R. Human androgen insensitivity syndrome. **Journal of Andrology** v. 16, n. 4, p. 299-303, Aug. 1995.

2 CUNHA, J. V. S. **Aplicação de Monte Carlo para geração de ensembles e análise termodinâmica da interação biomolecular.** 2016. 112 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2016.

IC54

Desenho de novas formas multicomponentes solidas de insumos farmaceuticos ativos antidepressivos.

SILVA, A. P. O. da [1]; ELLENA, J. A. [1]

anah221@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Durante este trabalho, teve-se como objetivo planejar, obter e caracterizar novas formas multicomponentes sólidas cristalinas dos insumos farmacêuticos ativos (IFA's)Bromazepam (BZP) e Diazepam (DZP) com o intuito de modular suas propriedades físico químicas com base nos Princípios da Engenharia de Cristais.(1) Realizou-se uma análise estrutural dos IFA's e em seguida a busca de conformadores com base nas formas sólidas já reportadas no Cambridge Structural Database (CSD).(2) Para a determinação da pureza dos IFA's e caracterização dos cristais obtidos, realizou-se as técnicas de difração de raios X de policristais (DRXP), calorimetria exploratória diferencial (CED), análise termogravimétria (TG) e espectroscopia Raman.Para a formação de um monocristal realizou-se diversos testes com condições, solventes e conformadores diferentes para cada IFA, porém infelizmente os fármacos utilizados neste trabalho reagem em grande parte somente com Benzodiazepinas, dificultando a padronização de um protocolo de cristalização envolvendo conformadores de outras classes. Além disto, a quebra do anel benzodiazepínico da molécula em meio ácido dificulta a formação de novos compostos mantendo a estrutura original do insumo farmacêutico.Assim após diversas tentativas com diferentes conformadores, e sem a formação de um monocristal viável ou de amostra policristalina pura optou-se por apresentar somente os dados referentes à caracterização dos insumos farmacêuticos ativos utilizados como matérias-primas, afim de se ter um controle e uma identidade térmica e espectroscópica para planejar de forma mais criteriosa os futuros testes de modificações.Ressaltando a suma importância da caracterização do estado sólido de IFAs, assim conhecendo seu comportamento e evitando possíveis problemas com polimorfismo, hidratação, etc.

Palavras-chave: Bromazepam. Diazepam. Benzodiazepinas.

Referências:

1 DINIZ, L. F. **Planejamento, obtenção e caracterização de novas formas sólidas de fármacos tuberculostáticos**.2017. 161p. Dissertação(Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos,2017.

2 GROOM, C. R.; BRUNO, I. J.; LIGHTFOOT, M. P.; WARD, S. C. The Cambridge structural database. **Acta Crystallographica B.** v.72, pt.2, p.171–179,2016.

IC55

Electro-crystallization of TiO2 nanotubes applied for H2 solar generation

SANTOS, L. F. L. S. [1]

leonardo.felipe.santos@usp.br

GONÇALVES, R. V. [2]

MEKO, J. C.

[1] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

TiO_2 nanotubes (TiO_2 NTs) has attracted attention nowadays due to its versatility as photoelectrochemical cells for H_2 generation (water splitting) (1-2), dye-synthesized solar cells (DSCs), biosensors, biocompatibility increase on metal implant and polluting degradation. (3) Water splitting might be the application with highest increase in research over the last years for metals oxide semiconductor as TiO_2, WO_3, Fe_2O_3, $BiVO_4$ and $SrTiO_3$, mainly with co-catalysts as noble metals nanoparticles (NP). Such materials have been studied due the ability of them to attend the requirements for H_2 production with economically viable efficiency. Crystalline and nano-scale particles are key factors for photocatalytic activity, then Anatase TiO_2 NTs is attractive to H_2 photosynthesis. (1) Anodization process is one of the most efficient and low-cost methods for TiO2 NTs synthesis, although the resultant oxide film is amorphous and requires annealing over 400 °C, in conventional furnaces, to be crystallized in Anatase (2), known as the most photocatalytic phase. Nevertheless, high temperatures commonly lead to nanotubes structure loss due to coarsening. Therefore, the TiO2 NTs field assisted crystallization (electro-crystallization) was studied to achieve phase transition under lower temperatures while keeping the nanotubes morphology. The titanium substrate and a platinum plate over the film were the electrodes for voltage appliance whilst the TiO_2 NTs layer was heated. Combining temperature and voltage this process allowed nanotubes crystallization around 230 °C with 20 V in a 4 μ m-thickness film. To control the crystal growth and preserve the morphology in nanoscale level, two parameters were studied: maximum temperature period and voltage. Photocurrent measurements demonstrated an increase in photocatalytic activity of 20V-10min crystallized sample more than twice of amorphous samples under UV-light at 1.23 V vs RHE.

Palavras-chave: Nanotubes. TiO2. Anatase. Field assisted crystallization.

Referências:

1 GONÇALVES, R. V. et al. Ta2O5 nanotubes obtained by anodization: effect of thermal treatment on the photocatalytic activity for hydrogen production. **Journal Physical Chemistry C**, v. 116, n. 26, p.14022–14030, 2012.

2 ZHANG, J. et al. Importance of the relationship between surface phases and photocatalytic activity of TiO2. **Angewandte Chemie,** v. 120, p.1790–1793, 2008. doi:10.1002/ange.200704788.

3 FERREIRA, I. V. L.; DANIEL, L. A. TiO2 heterogeneous photocatalysis in secondary wastewater treatment. **Engenharia Sanitária e Ambiental,** v. 9, n. 4, p.335–342, 2004.

IC56

Determinação de diagramas de bandas de energia de semicondutores por espectroscopia de raios X

SANTOS, L. F. S. E. [1]

lf.santos@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Podemos tirar importantes conclusões de materiais semicondutores através do conhecimento de suas bandas energéticas. A energia necessária para excitar um elétron da banda de valência e levá-lo à banda de condução, através da "zona proibida", determinada pela diferença energética entre essas bandas, é chamada band-gap do material. O laboratório LAPNano (Laboratory of Artificial Photosynthesis), do grupo de Nanomateriais e Cerâmicas Avançadas (NaCA), do IFSC - USP São Carlos, explora essa propriedade dos semicondutores visando realizar a quebra de moléculas de água em oxigênio e hidrogênio através unicamente da luz solar e de materiais com a posição das bandas adequada para fazer a quebra, possibilitando a obtenção de uma energia limpa e abundante. (1) Mesmo o conhecimento desse fenômeno não sendo tão recente, com os primeiros experimentos realizados na década de 70, quando A. Fujishima e K. Honda publicaram seus resultados com o dióxido de titânio (TiO 2)(2) ainda existem muitos desafios a serem superados para tornar a reação suficientemente eficiente para aplicações práticas. TiO 2 apresenta propriedades favoráveis para a reação de fotossíntese artificial, no entanto ele não é eficiente para aplicações em escala devido seu band-gap de 3.V, proporcionar absorção de fótons somente na região do UV, que representa 5% do espectro solar. Nos dias de hoje, a obtenção de materiais com elevada eficiência continua sendo um dos maiores desafios. A obtenção de materiais ou sistemas que possam realizar a quebra da molécula da água utilizando luz visível (cerca de 45% do espectro solar) é considerado o caminho mais promissor para aumentar a eficiência da reação da fotossíntese artificial. Para isso, a compreensão da estrutura eletrônica de semicondutores é primordial para desenvolver sistemas eficientes para a fotossíntese artificial. Desta forma, este projeto propõe a utilização da espectroscopia de fotoelétrons de raios X (XPS) e espectroscopia UV-Vis para a construção de diagramas de energia para determinar posição de suas bandas energéticas e, consequentemente, avaliação de suas propriedades como semicondutores para a fotossíntese artificial.

Palavras-chave: Especroscopia. XPS. UV-Vis. Nanomateriais. Hidrogênio solar.

Referências:

1 FUJISHIMA, A.; HONDA,K. Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode. **Nature**, v.238, n.7, p.37-38, 1972.

2 GONÇALVES, R. V. et.al. Photocatalytic water splitting by suspended semiconductor particles. In: SOUZA, F. L.; LEITE, E. R.(Ed.), **Nanoenergy** : nanotechnology applied for energy oroduction. New York: Springer International Publishing, 2018. p.107-140.

IC57

Estudos estruturais e funcionais de xilanases com potencial aplicação biotecnológica.

SEPULCHRO, A. G. V. [1]; POLIKARPOV, I. [1]

ana.sepulchro@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A bioconversão de biomassa é uma alternativa sustentável e eficaz para a atual necessidade de reformulação da matriz energética mundial.(1) Nesse aspecto, o entendimento do mecanismo de ação de enzimas hidrolíticas durante o processo de decomposição da parede celular vegetal é de fundamental importância. O atual projeto de pesquisa propõe estudos bioquímicos, biofísicos, e estruturais de xilanases, enzimas que atuam na degradação do xilano, principal constituinte da hemicelulose. (2) Para tal, genes de xilanases da família GH10 foram clonados pela técnica LIC (Ligation Independent Cloning) no vetor pET-TRX-1ª. A expressão heteróloga foi realizada tanto em células de expressão *Escherichia coli Rosetta* quanto em células *ArcticExpress*™, a fim de melhorar a solubilidade das proteínas. A expressão e solubilidade das proteínas foram avaliadas através de eletroforese em gel SDS-page. As proteínas solúveis foram purificadas por cromatografia de afinidade ao níquel, seguida por cromatografia de gel filtração. Com as frações puras de enzima, testes de determinação de atividade enzimática foram performados pelo método DNS. Também foram realizados ensaios de cristalização pela técnica de difusão de vapor por gota sentada. Das seis xilanases clonadas, duas se mostraram solúveis na cepa de *Escherichia coli Rosetta* e três na cepa *ArcticExpress* ™. A xilanase denominada P6D12 do organismo *Thermobacillus composti* , foi então a primeira a ser caracterizada. A enzima purificada foi encaminhada para teste de cristalização e ensaios de atividade. Apresentou atividade ótima na temperatura de 50 °C em pH 7. O painel de substratos mostrou que em xilano a enzima tinha sua maior eficiência de hidrólise (100%), apresentando também afinidade para o rye-arabinoxilano (67,5%). A atividade da enzima na degradação do substrato foi melhorada na presença do íon divalente MnCl2. Possível formação de cristais estão sendo monitoradas nas condições avaliadas. Até o presente momento, as seis enzimas propostas para o estudo já foram expressas e cinco delas estão solúveis. Foi realizado testes de atividades com a P6D12 com a qual as condições de cristalização estão sendo analisadas. As demais proteínas serão submetidas aos mesmos testes e, ao finalizar esse projeto, pretendemos ter um panorama capaz de relacionar e comparar a estrutura dessas enzimas com o seu comportamento bioquímico.

Palavras-chave: Xilanases. Xilano. Biomassa. Despolimerização.

Referências:

1 BIELY, P.; SINGH, S.; PUCHART, V. Towards enzymatic breakdown of complex plant xylan structures. **Biotechnology Advances**, v. 34, n. 7, p. 1260-1274, Nov. 2016.

2 LEITE, R.; LEAL, M. R. L. V. O biocombustível no Brasil**. Novos Estudos - Cebrap**, n. 78, p.15-21, jul. 2007.doi.org/10.1590/S0101-33002007000200003 .

IC58

Análises fenotípicas da linhagem Staphylococcus aureus SA43 após evolução dirigida com linezolida ou tedizolida

SILVA, G. V. [1,2]; daBUL, A. N. G. [2]; CAMARGO, I. L. B. C. [2]

geovana.silva13@gmail.com

[1] Universidade Paulista - UNIP

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

Infecções causadas por *Staphylococcus aureus* são recorrentes no ambiente hospitalar e casos de isolados mutirresistentes causam grande preocupação. O tratamento de tais infecções, muitas vezes, torna-se um obstáculo devido a interações medicamentosas e problemas de toxicidade das drogas disponíveis no mercado. (1)As oxazolidinonas estudadas neste projeto são antibióticos de último recurso usados em hospitais para o tratamento de infecções S. aureus. O objetivo deste projeto foi o de verificar se a exposição a linezolida ou a tedizolida por 28 dias poderia resultar em resistência a estas oxazolidinonas e ou a outros antimicrobianos que também agem nos ribossomos ou que são de último recurso. Para isso usamos *Staphylococcus aureus* SA43 que foi submetido a evolução dirigida (ED) com concentrações subinibitórias de linezolida e em paralelo com tedizolida, em triplicata (Experimentos A, B e C) por 28 dias segundo Dabul et al. (2). As CIMs de linezolida e de tedizolida de todas as amostras obtidas durante ambas EDs foram determinadas através de microdiluição em caldo. As amostras do dia 1 e do dia 28 de ambas as EDs tiveram suas CIMs de teicoplanina quinupristin/dalfopristin e vancomicina determinadas, bem como, foram avaliadas quanto a sensibilidade aos antimicrobianos amicacina, gentamicina, ciprofloxacina, sulfametoxazol/trimetoprim e tetraciclina por disco-difusão.Ambos os métodos foram realizados de acordo o *Clinical and Laboratory Standards Institute* (CLSI). No período estudado não emergiram mutantes resistentes à tedizolida, e apenas duas amostra do ED com linezolida tornou resistente ao mesmo. Dados preliminares deste estudo mostraram a possibilidade de evolução para um fenótipo de resistência a quinupristina/dalfopristina após exposição da linhagem de *S.aureus* SA43 à tedizolida ou à linezolida.O estudo ainda será continuado, pois não foi possível concluí-lo dentro do prazo devido ao período que a bolsista assumiu o projeto e devido ao atraso na entrega da linezolida.

Palavras-chave: Linezolida. Tedizolida. S. aureus. Resistência.

Referências:

1 AGENCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA. **Resistência microbiana**: mecanismos e impacto clínico. Disponível em: <http://www.anvisa.gov.br/servicosaude/controle/rede_rm/cursos/rm_controle/opas_web/modulo3/gramp_staphylo.htm>. Acesso em: 28 agosto2018.

2 DABUL, A. N. G. Resistance in *in vitro*-selected tigecycline resistant MRSA ST5 is driven by mutations in *mepR* and *mepA* genes. **Microbial Drug Resistance**, v. 24, n. 5, p. 519-526, 2018.

</li»

IC59

Caracterização de novos moduladores de microtúbulos com propriedades anticâncer

SILVA, E. M. G. [1]; MARTINS, C. T. [1]; MAGALHAES, L. G. [1]; RUSSOWSKY, D. [2]; ANDRICOPULO, A. D. [1]

ellen.giliotti.silva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS.

Câncer é a denominação de um conjunto de doenças causadas pelo crescimento desordenado de células anormais que possuem capacidade de invadir e migrar por diversos tecidos e órgãos. De acordo com a *International Agency for Research on Cancer* (Iarc), da Organização Mundial da Saúde (OMS), o câncer é um problema de saúde pública, principalmente em países em desenvolvimento. A estimativa para 2025 é que cerca de 20 milhões de novos casos de carcinoma sejam registrados. No Brasil, são estimados cerca de 600 mil novos casos da doença para 2017, segundo o Instituto Nacional do Câncer (INCA).(1) Apesar da vasta quimioterapia anticâncer disponível, ela não é suficiente para lidar com estas doenças. Um dos principais obstáculos para o sucesso do tratamento é o fenômeno de resistência aos fármacos utilizados, cerca de 90% dos cânceres metastáticos não respondem positivamente ao tratamento.(2) As células cancerosas se tornam diferenciadas devido as alterações que acontecem em seu material genético (DNA), tornando-as células insensíveis aos seus mecanismos de auto reparação. Estas novas características envolvem uma complexa rede de vias bioquímicas, entre as quais pode-se identificar múltiplos alvos para ações terapêuticas.Os microtúbulos são polímeros constituídos por dímeros de α e β tubulina e são considerados um dos alvos moleculares mais bem estabelecidos para o tratamento do câncer. Eles desempenham um papel essencial em muitos processos celulares por meio da polimerização e despolimerização da proteína tubulina. Entre esses processos podemos destacar a migração e a divisão celular.(3) Para a eleção de novos compostos moduladores da tubulinatanto, foram empregadas técnicas computacionais para o planejamento de fármacos baseado na estrutura do receptor. Os compostos selecionados para a triagem foram avaliados por meio de ensaios celulares e por meio de ensaios bioquímicos com a proteína tubulina. Posteriormente, a caracterização dos danos causados pela ação dos compostos, como por exemplo a interrupção do ciclo celular na fase G_2/M foi feita através da técnica de citometria de fluxo. A triagem de novas moléculas foi feita a partir de uma série de híbridos de dihidropirimidinona-chalconas, chalconas e dihidropirimidinonas.

Palavras-chave: Câncer. Microtúbulos. Tubulina. Biologia molecular. Planejamento de fármacos.

Referências:

1 SANTOS, R. N. **Planejamento de moduladores de polimerização de microtúbulos com propriedades anticâncer, análise estrutural de macromoléculas e geração de uma base virtual de produtos naturais**. 2015. 187f. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2015.

2 HUBER, P. C.; MARUIAMA, C. H.; ALMEIDA, W. P. Glicoproteína-p, resistência a múltiplas drogas (mdr) e relação estrutura-atividade de moduladores. **Quimica Nova**, v. 33, n. 10, p. 2148–2154, 2010.

3 DUMONTET, C. et al.Microtubule-binding agents: a dynamic field of cancer therapeutics. **National Review Drug Discovery,** v.9, n.10,p,790–803, 2010.

IC60

Pinças opticas para nanopartículas: explorando teoria, experimento e simulações numéricas.

SILVA, P. F. [1]; MUNIZ, S. R. [1]; MARTINS, T. T. [1]

pedro.faleiros.silva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As pinças ópticas consistem-se, basicamente, na geração de um potencial de aprisionamento através da focalização de um laser colimado por uma objetiva de grande abertura numérica. (1) Desde sua descoberta em 1970, encontra-se uma vasta literatura sobre seu tratamento e aplicação em dois principais limites: quando o comprimento de onda do laser é muito menor que o raio da partícula aprisionada (limite geométrico) e quando o mesmo é muito maior (limite dipolar). Todavia, a compreensão deste fenômeno em uma escala intermediária, como no aprisionamento de partículas com raio da ordem de centenas de nanômetros, mostra-se mais complexa e requer um tratamento eletromagnético mais rebuscado, sendo este, importante para aplicações recentes das pinças no estudo de física fora do equilíbrio em escala nanométrica. (1-2) Diante disso, a proposta desse trabalho é fazer um estudo sobre a modelagem de pinças ópticas para nanopartículas, abordando os principais tópicos da teoria eletromagnética (1) para esses sistemas e como eles influenciam a caracterização experimental de pinças ópticas. Além disso, uma das propostas desse trabalho é realizar simulações numéricas pelo método dos elementos finitos através do software COMSOL das forças ópticas sobre nanopartículas, buscando analisar em última instância como as mesmas influenciam o gradiente de temperatura da partícula e os limiares de aprisionamento, afim de analisar sistemas fora do equilíbrio.

Palavras-chave: Pinças opticas. Forças opticas. COMSOL. Nanopartículas.

Referências:

1 JONES, P. H.; MARAGÒ, O. M.; VOLPE, G. **Optical tweezers**: principles and applications. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.

2 MARAGÒ, O. M. et al. Optical trapping and manipulation of nanostructures. **Nature Nanotechnology, v.**8, n.11, p.807-819,2013.

IC61
O Dêuteron e a escala de massa do modelo padrão

SILVA, A. H. [1]
adonai.silva@usp.br
BOITO, D. R. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é produzir um modelo realista para o dêuteron, estado ligado de um próton e um nêutron, e assim poder estudar sua energia de ligação como função da massa do píon. Desta forma, as propriedades deste estado podem ser relacionadas ao valor esperado do campo de Higgs no vácuo, através da fórmula de Gell-Mann, Oakes e Renner. O dêuteron é um estado muito particular, sua energia de ligação é muito pequena quando comparada à massa dos constituintes. Além disso, o estado fundamental é uma superposição de estados com momento angular orbital $l = 0$ e $l = 2$. (1-2) Se trata de um estado fracamente ligado, e essa ligação, devida ao potencial do tipo Yukawa, depende, evidentemente, do valor da massa do píon, que faz o papel de mediador da força nuclear. (3) Para valores maiores de massa, o estado tende a se desligar, pois o alcance do potencial diminui ainda mais. Tendo em vista o processo de nucleossíntese estelar, será estudado quais valores deste parâmetro fundamental do modelo padrão (valor esperado do campo de Higgs no vácuo) seriam compatíveis com a existência de elementos complexos em um universo hipotético, em que somente este parâmetro difere do valor que conhecemos. A inexistência de um estado ligado próton-nêutron teria consequências drásticas para o universo tal qual conhecemos. A nucleossíntese estelar depende da fusão de um dêuteron e de um próton para gerar 3He. Sem o dêuteron, essa reação não poderia ocorrer, o que alteraria radicalmente toda a nucleossíntese e a abundância dos elementos no universo. Em última análise até a existência de vida tal como conhecemos estaria comprometida.

Palavras-chave: Dêuteron. Píon. Estado ligado.

Referências:

1 BERTULANI, C. A. **Física nuclear**. Disponível em: <https://social.stoa.usp.br/articles/0016/0702/FisicaNucl
Acesso em: 23 jan. 2018.

2 SWIECA, J. A. **Nuclear physics**. Disponível em: <https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_-
Public/21/089/21089067.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2018.

3 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to elementary particles**. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2010.

IC62

Otimização dos parâmetros da transformada inversa de Laplace para aplicações em ressonância magnética de meios porosos

SOLCIA, G. [1]; MONTRAZI, E. T. [1]; PAIVA, F. F. [1]

gustavo.solcia@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste projeto é aplicar algoritmos que fazem uso da Transformada Inversa de Laplace para remover a opção de escolha dos parâmetros de regularização de Tikhonov, sendo eles o número de pontos (η) do vetor de tempos T_2 e o parâmetro de peso da regularização ($\alpha\alpha\alpha\alpha$), do usuário e otimizar sua seleção com base em estudos de espaços de características e propriedades da transformada. Pela minimização do funcional Tikhonov, utilizando M_i como a magnetização discretizada pela CPMG na distribuição g_μ, é possível obter (1-2) $g_\mu = ({K_{i\mu}}^\dagger K_{i\mu} + \alpha\alpha\alpha\alpha {B_{i\mu}}^\dagger B_{i\mu})^{-1} {K_{i\mu}}^\dagger M_i$, onde $K_{i\mu}$ é a matriz de núcleo da transformada, $B_{i\mu}$ o operador de regularização de segunda derivada. Para estudar a variação dos parâmetros de regularização, realizou-se simulações centradas em 5, 0,5 e 0,05 segundos com largura de 4 e 6 unidades com soma de exponenciais em 10, 100 e 1000 por segundo proporcional à década temporal. Ao medir as características como largura meia altura (LMA), posição de pico e soma da intensidade de amplitudes na distribuição foi possível gerar superfícies com mínimos locais em uma grade de parâmetros. A minimização global é obtida através da criação de um espaço tridimensional das características. Para distribuições vindas de sinais não simulados, a análise dos parâmetros será feita através da extensão do método conhecido como curva L. (3) Com o processamento de mil sinais, cada variação da simulação possuirá um mínimo global mais recorrente em uma matriz de distâncias euclidianas e portanto um par de parâmetros otimizados. Uma vez que cada distribuição pode ser representada como um ponto no espaço de características, cria-se uma nuvem de resultados onde seu centroide indica informações sobre a convergência e erro da transformada. A criação de superfícies de extensão L levam a observação de quebras de simetria em caminhos tomados pelos $\alpha\alpha\alpha\alpha$'s além de mudanças geométricas na região de resíduo distante para diferentes décadas temporais. Foi possível observar que existe a convergência de resultados das distribuições simuladas pela análise das nuvens de distribuição. Além disso, as quebras de simetria indicaram transições de fase em picos de distribuições experimentais.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Meios porosos. Relaxometria. Transformada inversa de Laplace.

Referências:

1 ENGL, H. W.; HANKE, M.; NEUBAUER, A. **Regularization of inverse problems**. Dordrecht: Kluwer, 1996. (Mathematics and its applications)

2 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. J.; LATORRACA, G. A. (Eds.) **Nuclear magnetic resonance**: petrophysical and logging applications. Amsterdam: Pergamon, 2002. (Handbook of geophysical exploration: seismic exploration, 32)

3 BAUER, F.; LUKAS, M. A. Comparing parameter choice methods for regularization of ill-posed problems. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 81, n. 9, p. 1795-1841, May 2011.

IC63
Um estudo sobre a termodinâmica de temperatura negativa

SOUSA, G. [1]
guilherme2.sousa@usp.br
BRITO, F. B. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é estudar as diferentes definições de entropia e consequentemente de temperatura que têm sido debatidas na literatura. (1-2) Em particular a discussão se dá entre o uso das entropias de Boltzmann e Gibbs. Tendo como base as discussões (2-3), a ideia do projeto é estudar e procurar modelos capazes de apresentar estado estacionário térmico e que possam ser tratados no regime de interação forte. A ideia inicial é a de utilizar uma versão estendida do modelo de Jaynes-Cummings para a interação de átomos com o campo elétrico. A presença de um contínuo de energia para o qual o sistema de interesse pode perder energia pode conferir a dinâmica dissipativa esperada para a análise proposta. Isso posto, o embate termodinâmico se dá pois no *ensemble* microcanônico a entropia de Boltzmann, também chamada de entropia superficial, é calculada com soma dos estados pertencentes à uma região estreita de energia. Enquanto que a entropia de Gibbs, também conhecida como entropia volumétrica, é calculada pela soma de todos os estados com energias menores que um dado valor. Uma vez definida a entropia, calcula-se a temperatura pela diferenciação com respeito à energia. Das duas definições anteriores é possível observar que a entropia de Boltzmann admite temperaturas negativas quando o sistema tem um limite superior de energia, pois a entropia diminui no regime de inversão de população. (1) Diferentemente, a entropia de Gibbs possui sua temperatura associada positiva definida já que a entropia é uma função estritamente crescente. O estudo sobre a termodinâmica de temperatura negativa está intimamente associado com a definição de entropia utilizada. A ideia do projeto é estudar essas discussões para o regime de acoplamento forte do sistema com o reservatório, onde acredita-se que seja possível tirar conclusões sobre a validade das definições de entropia.

Palavras-chave: Termodinâmica. Entropia. Temperaturas negativas.

Referências:

1 RAMSEY, N. F. Thermodynamics and statistical mechanics at negative absolute temperatures. **Physical Review**, v. 103, n. 1, p. 20, 1956.

2 DUNKEL, J.; HILBERT, S. Consistent thermostatistics forbids negative absolute temperatures. **Nature Physics**, v. 10, p. 67-72, 2014. doi.org/10.1038/nphys2815

3 HILBERT, S.; HÄNGGI, P.; DUNKEL, J. Thermodynamic laws in isolated systems. **Physical Review E**, v. 90, n. 6, p. 062116, 2014.

IC64
Topologias e dinâmicas neuronais

SOUZA, P. J. P. [1]
paulo.paulino.souza96@gmail.com
COMIN, C. H. [2]
COSTA, L. F. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP
[2] Departamento de Computação - UFSCar

A teoria de redes complexas é ciência que envolve diversas outras, sendo marcada pela sua interdisciplinaridade e alto potencial de aplicações. Uma das questões fundamentais dessa ciência é entender a relação entre a topologia de uma rede complexa e um dado processo dinâmico. Em casos que as redes complexas são não dirigidas essa relação é bem entendida para o passeio aleatório não enviesado. (1) Porém quando são colocadas direções nessas redes, que é o caso de redes neuronais, essa relação passa a ser mais complexa. Nesse estudo foi investigado o passeio aleatório em redes dirigidas provenientes dos modelos teóricos mais tradicionais como o modelo de Barabasi-Albert(BA), Erdos-Renyi(ER), Watts-Strogatz(WS) e o modelo geográfico de Waxman(WX). Para fazer uma análise da relação topologia e dinâmica foi utilizado o steerring coeffficient(sc) que é uma medida de correlação entre o grau de um determinado nó com sua ativação pela dinâmica e para medir a direcionalidade da rede foi utilizado a medida de reciprocidade que é a razão entre as arestas direcionadas na rede e o total de arestas. (2) Para a análise dessa relação em função da reciprocidade da rede foi apresentado um método para aumentar a direcionalidade da rede e ele se consiste em escolher um nó com probabilidade proporcional a alguma medida local, depois escolher um vizinho segundo a mesma distribuição de probabilidade e essa aresta formada é redirecionada para algum nó da rede. As medidas locais utilizadas foram o grau, o clustering coefficient e o matching index, também, foi considerado um cenário onde essa distribuição era uniforme. Os resultados foram diversos(3), os modelos de ER e BA não foram afetados consideravelmente pela adição de direcionalidade, sendo que o sc foi decaindo quase linearmente e a curva do grau foi ligeiramente mais inclinada. As rede WX, também, apresentaram o comportamento linear, mas o sc decaiu entre 40% e 60% sendo que caiu mais na estratégia pelo clustering coefficient. As redes WS exibiram curvas sobreposta e com um mínimo sc perto de reciprocidade 1. Foi concluído que a direção influência na relação entre a topologia e a dinâmica e, além disso, foi visto que diferentes topologias e estratégias de aumento de direcionalidade influenciam de maneira diferente a relação entre a topologia e a dinâmica para o passeio aleatório não enviesado.

Palavras-chave: Redes complexas. Passeio aleatório.

Referências:

1 COSTA, L. F. et al. Correlations between structure and random walk dynamics in directed complex networks. **Applied Physics Letters**, v. 91, n. 5, p. 054107, 2007.

2 COSTA, L. F. et al. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.

3 SOUZA, P. J. P.; COMIN, C. H.; COSTA, L. F. Topology and dynamics in complex networks: the role of edge reciprocity. **EPL** (Europhysics Letters), v. 122, n. 2, p. 26001, 2018.

IC65

Desenvolvimento de padrões de referencia para sistemas ópticos em biofotônica.

SOUZA, G. de [1]; ROMANO, R. A. [1]; MORIYAMA, L. T. [1]; KURACHI, C. [1]

giian.souza@hotmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Introdução: Através da detecção de fluorescência é possível ter uma técnica de resposta rápida, minimamente invasiva e de baixo custo relativo, além de eficiente e de possível aplicação em diversos campos, tais como processos clínicos, bioprocessos e aplicações ambientais.A fluorescência pode ser detectada em termos da sua intensidade, das diferenças de comprimento de onda, da anisotropia, do tempo e da sua modulação de fase. Através destas informações é possível determinar diferenças entre analitos. A instrumentação envolvida nas técnicas ópticas pode ser variada e os componentes elétricos e eletrônicos podem ocasionar oscilações no sinal emitido e coletado, tornando necessário o uso de uma referência óptica que permite padronizar o sinal coletado ao ser analisado.(1) Padrões de referência são geralmente comercializados por empresas especializadas e possuem aplicação para um único fenômeno óptico, ou seja, existem padrões de refletância, padrões de fluorescência, padrão de tempo de vida de fluorescência, etc. Para as aplicações biomédicas, onde as amostras possuem amplo intervalo espectral de avaliação, seria interessante haver um único padrão de referência que combinasse em si todas as propriedades que desejam ser avaliadas.Objetivos:Visando a maximização de precisão em experimentos, este projeto teve por objetivo determinar um método de padronização e verificação da estabilidade de equipamentos de espectroscopia através da construção de padrões de referência para medidas de fluorescência e tempo de vida de fluorescência. Métodos e Procedimentos:Foram utilizados materiais comuns (como borracha e PVC) a fim de comparação com padrões produzidos em laboratório compostos de silicone bi-componente e resina epóxi bi-componente, ambos com espalhadores e/ou absorvedores e uma solução de Rodamina G6.As medidas de fluorescência, tempo de vida de fluorescência foram realizadas utilizando um sistema de espectroscopia composto de lasers de excitação contínuos de comprimento de onda de 408 nm e 532 nm, e lasers pulsados em 378 nm e 445 nm.Por fim, foi determinado um método para a estimar da potência do laser de excitação pela fluorescência de estado estacionário e a definição de medidas padrões para ambos os métodos de medida de fluorescência.Resultados: Foram realizadas medidas de fluorescência em dias diferentes para a definição de um valor médio para as espectrometrias de fluorescência nos comprimentos de onda disponíveis para as medidas de espectrometria.A partir dos dados obtidos, foi realizada uma análise para: definir um padrão de tempo de decaimento da fluorescência para cada comprimento de onda de excitação, avaliar seu desvio padrão e determinar os padrões de espectro de fluorescência de estado estacionário. Após este processo, notou-se que apenas a solução de Rodamina era um bom padrão para esse fim, pois os outros apresentaram espectros de fluorescência com baixa razão sinal/ruído. Por fim, a partir dos padrões de espectro de fluorescência de estado estacionário pôde-se estimar o valor da intensidade do Laser sem a necessidade da utilização de um medidor de potência.Conclusões:Conclui-se que através da construção de padrões, pode-se construir uma padronização para os equipamentos espectroscópicos e um um padrão para medidas experimentais posteriores.

Palavras-chave: Tempo de vida de fluorescência. Espectroscopia. Fluorescência.

Referências:

1 EREZIN, M.l Y.; ACHILEFU, S. Fluorescence lifetime measurements and biologicalilmaging. **Chemical Reviews,** v. 110, n. 5,p.2641-2684, 2009.

IC66
Incorporação de Sr em vidros fosfatos de Ca

TSUNAKI, L. B. E. [1]

lucas.tsunaki@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos- USP

O estrôncio vem demonstrando propriedades terapêuticas nas áreas da medicina e da odontologia (1), com isso diversas aplicações que aproveitem tais propriedades vêm sendo estudadas. Entre elas se destaca a incorporação do cátion de estrôncio em biovidros, onde o Sr+2 substitui estruturalmente o Ca+2 devido à similaridade química entre os cátions. Assim, o objetivo deste projeto é verificar se há ou não diferenças estruturais decorrentes da substituição do Ca+2 pelo Sr+2 em um sistema modelo de polifosfato e identificá-las caso ocorram. Foi preparada uma série de vidros seguindo a estequiometría: 0,29 Na2O • (0,28 – x) CaO • x SrO • 0,43 P2O5. Realizamos experimentos de ressonância magnética nuclear de alta resolução dos núcleos 31P na condição de rotação em torno do ângulo mágico, com pulsos $\pi/2$ de 2μ s e tempo de relaxação de 120s. A partir das ressonâncias encontradas extraímos o desvio químico isotrópico médio (δ iso) e a largura a meia altura (FWHM) das unidades de fosfato formadoras de rede. O volume molar de cada amostra foi obtido pelo princípio de Arquimedes. A técnica de calorimetria diferencial de varredura foi aplicada com intuito de se determinar a temperatura de transição vítrea (Tg), com taxa de aquecimento de 10°C/min. Os valores de 31P-δ iso em função da concentração de estrôncio apresentaram um crescimento linear, o que aponta uma tendência de diminuição do caráter covalente da ligação do cátion com os oxigênios não ligantes dos grupos formadores de fosfato. (2) Quanto à FWHM, foi observado um decrescimento linear, indicando uma diminuição na desordem em torno dos núcleos 31P. O volume molar inicialmente se mantém constante com a substituição de Ca+2 por Sr+2, indicando que o Ca+2 deve dominar o comportamento do empacotamento das cadeias para baixas concentrações de Sr+2, mas após aproximadamente 0,07 de fração molar de Sr+2 há um crescimento linear que aponta um empacotamento menos denso das cadeias. De modo geral, a Tg apresenta um decrescimento com a substituição de Ca+2 por Sr+2, evidenciando um aumento na mobilidade das cadeias de fosfato. Os resultados apontam que a incorporação de estrôncio no lugar do cálcio cria sistemas vítreos com unidades tetraédricas de fosfato menos desordenadas, onde as ligações do cátion com os oxigênios não ligantes se tornam menos covalentes, com suas cadeias menos empacotadas e possuindo maior mobilidade. Tais comportamentos podem ser explicados em função do menor potencial iônico do Sr+2, que gera interações mais fracas com os oxigênios das cadeias de fosfato. Portanto, ambos os cátions não desempenham influências estritamente homólogas em sistemas vítreos.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Sistemas vítreos polifosfato. Biovidros estrôncio.

Referências:

1 MARIE, P.J. Strontium ranelate: new insights into its dual mode of action. **Bone**, v. 40, supl.1, p.S5-S8, 2007.

2 BROWN, R.K.; PHIFER, G.L.;TURNER, R.; KIRKPATRICK, J.J. Cation effects on ^{31}P MAS NMR chemical shifts of metaphosphate glasses. **Journal of the American Ceramic Society**, v.74,n.6, p.1287-1290,1991.

IC67
A causal approach to recover networks fromdata

MARTINELLI, T. [1]
tiago.martinelli@usp.br
RODRIGUES, F. A. [2]
SOARES-PINTO, D. O. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP
[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Inferring large-scale networks from time series data extracted from dynamical processes remains to be a relatively open problem. In contrast, causality often appears as an axiom in the formulation of dynamical equations, typically as the assumption that effects cannot precede their causes. However, what is often left unclear is which general principles should be used to define causal relations. As an active area of research in the fields of machine learning and statistics, causal discovery algorithms consists in modelling rigorously causal relationships that hold among a dataset from the correlations that these exhibit. Provided that, one has a powerful set of tools for identifying a network structure from observed data allowing to build the corresponding Bayesian network GG, also called the directed acyclic graph (DAG), from data. (1) Nonetheless, when the data comes from a complex dynamics the causation network inference method should fulfill some requirements to give a practical causal discovery algorithm. (2) In this scenario, we are interested in applying resources of information and causality theory in complex dynamics to derive an informational-theoretic measure which quantifies the causal strength $\mathfrak{C}_S$CS of arrows in a set $S \subset G$S⊂G. (3) This will allow, in principle, to construct such algorithm to recover the network topology behind.

Palavras-chave: Complex networks. Causal inference. Information theory.

Referências:

(1) PEARL, J. **Causality**: models, reasoning and inference. Cambridge: Cambridg University Press, 2000.

(2) SPIRTES, P.; GLYMOUR, C.; SCHEINES, R. **Causation, prediction, and search**. 2nd ed. Cambridge: MIT Press, 2000.

(3) JANZING, D. et al. Quantifying causal influences. **Annals of Statistics**, v. 41, n. 5, p. 2324–2358, 2013.

IC68
Descrição teórica de neutrinos de altas energias

TIBURCIO, B. H. C. [1]

bruna.tiburcio@usp.br

[1]Instituto de Física - UNICAMP

Nesse projeto, os objetivos foram o estudo de neutrinos na região externa a um objeto massivo, bem como a generalização da métrica de Schwarzschild. (1) Partindo da mecânica quântica de Schrödinger e da álgebra de Lorentz, estudou-se a equação de Dirac no espaço-tempo plano – para férmions com e sem massa – de modo a se obter uma descrição relativística para neutrinos.(2)Ao reescrever a equação de Dirac no espaço-tempo curvo, foi necessário introduzir os conceitos de plano tangente, *vierbien*, derivada covariante e *spin connection.(3)*Para férmions sem massa, a equação de Dirac no espaço-tempo curvo é $[\gamma^a {e_a}^\mu(\partial_\mu + \Gamma_\mu)]\,\Psi = 0$,(1) onde a *vierbien* ${e_\mu}^a$ é definida por $g_{\mu\nu} = \eta_{ab}{e_\mu}^a{e_\nu}^b$. (2) *O spin connection* Γ_μ é dado por $\Gamma_\mu = \frac{1}{8}\left[\gamma^a, \gamma^b\right]{e_\mu}^\nu(D_\mu e_{b\nu})$, (3) e a derivada variante D_μ $D_\mu e_{b\nu} = \partial_\mu e_{b\nu} - \Gamma^\rho_{\mu\nu}e_{b\rho}$. (4) Após o estudo da métrica de Schwarzschild, dada por $ds^2 = -\left(1 - \frac{2M}{r}\right)dt^2 + \left(1 - \frac{2M}{r}\right)^{-1}dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2\sin^2\theta d\varphi^2$ (5) foi feita uma generalização dessa métrica: $ds^2 = -A(r)dt^2 + B(r)dr^2 + r^2(d\theta^2 + sin^2\theta d\varphi^2)$, (6) que mantém as propriedades de estaticidade e simetria esférica. Construiu-se a *vierbien* ${e_\mu}^a = diag\left(\sqrt{A(r)}, \sqrt{B(r)}, r, r\sin\theta\right)$, (7) e, então, as componentes da equação de Dirac $\gamma^a {e_a}^\mu\partial_\mu = \gamma^0\frac{1}{\sqrt{A(r)}}\frac{\partial}{\partial t} + \gamma^1\frac{1}{\sqrt{B(r)}}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\gamma^2}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\gamma^3}{rsin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ (8) $\gamma^a {e_a}^\mu\Gamma_\mu = \gamma^1\frac{\sqrt{B(r)}}{2}\left(\frac{A'(r)}{2B(r)A(r)} + \frac{2}{rB(r)}\right) + \gamma^2\left(\frac{cotg\theta}{2r}\right)$. (9)

Palavras-chave: Neutrinos. Equação de Dirac. Espaço-tempo curvo.

Referências:

1 GRIFFITHS, D. J., **Introduction to elementary particles**. New York; Wiley-VCH, 1987.v.1.

2 GIUNTI, C.; KIM, C. W. **Fundamentals of neutrino physics and astrophysics**. Oxford: Oxford University Press,2007.

3 POLLOCK, M. D. On the Dirac equation in curved space-time. **Acta Physica Polonica B,** v.41, n.8, p.1827-46, 2005.

IC69
Potencial de aprisionamento tipo caixa para átomos frios

TORTORELLI, G. P. [1]; HENN, E. A. L. [1]

gabriel.gbltp@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Um átomo de dois níveis na presença de um campo elétrico oscilatório, ciclicamente absove e reemite fótons à uma taxa temporal conhecida como ciclo de Rabi. A inversa desta taxa é denominado de frequência de Rabi e é dada por:$\Omega = \frac{e}{\hbar}\int \psi_1^*(r)\vec{r}\cdot\vec{E}\psi_2(r)d^3r$.Onde ψ_1 e ψ_2 são as funções de onda do estado fundamental e do excitado, **r** o vetor momento de dipolo da transição e $\mathbf{E_0}$ o vetor campo elétrico.A interação do momento de dipolo com o campo elétrico gera um potencial dipolar e seu gradiente é uma força descrita por:$F_{Dipolo} = -\frac{\hbar\delta}{2}\frac{\Omega}{\Omega^2/2}\delta^2 + \Omega^2/2 + \Gamma^2/4\frac{\partial\Omega}{\partial z}$.Na qual δ é a dessintonia, a diferença entre as frequências do campo elétrico e da transição atômica, e Γ é a taxa de decaimento espontâneo do estado excitado(1-2).Caso seja usado uma dessintonia positiva é gerado um potencial repulsivo (blue detuning) caso contrário há um potencial atrativo (red detuning).Para fazer a armadilha um feixe de laser de 405 nm passa pela lente Axicon gerando um volume onde os átomos estarão contidos. O laser é dessintonizado para o azul da transação de 421 nm do átomo de disprósio, tornando as paredes repulsivas e aprisionando os átomos num potencial do tipo caixa(3).

Palavras-chave: Axicon. Armadilha. Disprósio. Potencial.

Referências:

1 FOOT, C. J. **Atomic physics**. New York: Oxford University Press, 2005. (Oxford master series in atomic, optical and laser physics)

2 GRIMM, R.; WEIDEMÜLLER, M.; OVCHINNIKOV Y. B. Optical dipole traps for neutral atoms. **Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics,** v. 42, p. 95-170, 2000. doi: 10.1016/S1049-250X(08)60186-X.

3 KULIN,S. et al. A single hollow-beam optical trap for cold atoms. **Journal of Optics B**, v. 3, n. 6, p. 353-357, 2001.

IC70

Caracterização óptica da permeabilidade da membrana de candida albicans para fotossensibilizadores

VICENTE, M. L. F. [1]; NIRO, C. M. [1]

maria.luiza.vicente@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: Estudar a interação e a internalização, permeabilidade da membrana, do fotossensibilizador (FS), Photodithazine© sob diferentes condições de pré-iluminação durante o período de incubação em células de *Candida albicans.* caracterizando ópticamente.(1) **Métodos e Procedimentos:**Utilizou-se de métodos ópticos como espectro de absorbância para caracterizar o fotossensibilizador Photodithazine©, determinação da função para cálculo de UFC/ml de *Candida albicans.*, eficiência qualitativa após a pré-iluminação destes. Pré-iluminação com a *biotable* 660nm para fins de Inativação fotodinâmica de *Candida albicans.* e fotodegração característica do FS Photodithazine©. Microscopia de fluorescência Confocal como instrumento de visualização da internalização do FS com a célula, sua mobilidade na célula e também através do kit de viabilidade *live-dead* a morte e dano celular causada pela pré-iluminação.**Resultados:**Para aumentar a internalização é possível pré iluminar o Photodithazine© em 450nm durante o período de incubação pois aumenta a interação deste com a célula, pudemos ver isso através de microscopia confocal acompanhando regiões que sofreram iluminação a 405nm e tinha maior fluorescência que as regiões incubadas no escuro. Além do acompanhamento com a microscopia foi possível observar este mesmo efeito com a pré-iluminação de mesa *biotable*. Mostrou-se também a internalização nas paredes celulares da *Candida albicans.* com as imagens feitas em confocal. A Mobilidade do FS foi mostrada através do *photobleaching* de uma região comparando o tempo de vida de fluorescência com outra região e mostrou que a fluorescência dessa região decaía e depois ultrapassava o da região não iluminada além de apresentar uma área homogeneizada. Todas as pré-iluminações foram feitas de forma contínua e após isso pré-iluminações seriadas foram aplicadas para a comparação, mostrou-se através de espectros de absorbância de viabilidade que a morte celular de uma mesma concentração de FS até 10mg/ml é mais eficaz em doses seriadas do que em doses únicas além de com microscopia confocal validar qualitativamente a intensidade da fluorescência do kit *live-dead* de dano celular.**Conclusões:**A pré-iluminação na incubação da Photoditazine© em *Candida albicans.* a 450nm é mais eficaz do que a incubação no escuro, além de homogeneizar. Há mobilidade do FS do meio celular para as regiões que sofreram *photobleaching*. A pré-iluminação a 660nm para inativação fotodinâmica é mais eficaz se feita de maneira seriada do que de maneira única, causando maior morte celular e dano.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. Fotossensibilizador. Photodithazine©. Candida Albicans.

Referências:

1 ROMANO, R. A. **Aumento a eficiência da inativação fotodinâmica pela incorporação de fotossensibilizador induzida por luz em *Candida albicans.*** 2016.117p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

IC71

Descoberta de novos compostos Híbridos de Artesunato e Artemisininacomo novos candidatos para o desenvolvimento de antimaláricos

ZANINI, C. L. [1]; SANTOS, C. R. D. [2]; AGUIAR, A. C. C.[1]

camila.zanini@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Química - UNICAMP

A malária é uma doença parasitária responsável por altas taxas de mortalidade e morbidade. Esta doença é transmitida por mosquitos do gênero *Anopheles spp.* e está presente principalmente em regiões tropicais e subtropicais do mundo. Seu tratamento é realizado através da combinação de derivados de Artemisinina e alguma outra classe de antimalárico, como, por exemplo, mefloquina e lumefantrina (ACT). Porém, registros de resistência aos antimaláricos, incluindo os derivados da Artemisinina, já foram relatados ao redor do mundo, sendo necessário o desenvolvimento de novos medicamentos para o tratamento da doença.Visando o desenvolvimento de um novo candidato pré-clínico para o tratamento da malária humana, o grupo do Prof. Carlos Roque da UNICAMP desenvolveu uma nova série de compostos, denominados de Marinoquinolinas, com atividade bastante promissora. (1) Sendo assim, alguns compostos desta classe foram hibridizados com os antimaláricos artemisinina e artesunato, originando os híbridos **HB002**, **HB003**, **HB004** e **HB005**. Estes novos compostos foram avaliados durante o desenvolvimento deste projeto. Os 4 híbridos foram avaliados in vitro contra a cepa 3d7, sensível à cloroquina, e K1, multiresistente, de *Plasmodium falciparum,* apresentando um aumento na potência de até 6 vezes quando comparado aos antimaláricos sozinhos. Além disso, os híbridos foram altamente tolerados pelas células de hepatoma humano (HepG2) e em testes de hemólise in vitro.Por fim, avaliou-se a capacidade dos híbridos em eliminar estágios dormentes de formas assexuadas após o tratamento com uma dose única de medicamento, este ensaio é conhecido como teste de recrudescência dos anéis. Os híbridos **HB002** e **HB004** foram mais ativos do que o antimalárico artemisinina, eliminando os parasitos após o tratamento único. Sendo assim, a partir dos estudos realizados durante a execução deste projeto foi possível identificar novos compostos híbridos mais ativos do que os antimaláricos artemisinina e artesunato, menos tóxicos e com capacidade de eliminar as formas assexuadas dormentes.

Palavras-chave: Malária. Híbrido. Plasmodium Falciparum. Marinoquinolinas.

Referências:

1 AGUIAR, A. C. C, et al. **Discovery of marinoquinoli-nes as potent and fast-acting plasmodium fal-ciparum inhibitors withiln vivo activity**. São Carlos: CIBFar, 2018. Disponivel em: <ibfar.ifsc.usp.br/2018/06/19/discovery-of-marinoquinolines-as-potent-and-fast-acting-plasmodium-falciparum-inhibitors-with-in-vivo-activity/>. Acesso em: 04 set. 2018.

IC72

Estudo de técnica de vídeo-ceratometria e desenvolvimento de protótipo de baixo custo para biometria ocular

LAISSENER, B. S. [1]; OLIVEIRA, A. O. [1]; CASTRO NETO, J. C. [1]

brunosl@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A catarata é descrita como a opacificação parcial ou total do cristalino, fazendo com que o funcionamento da visão seja comprometido, podendo inclusive levar à cegueira. Uma das principais causas da catarata (apontada como 85% dos casos) é a senil, ou seja, alterações bioquímicas devidas ao envelhecimento. (1) Nesse contexto, nosso projeto teve em sua pauta aspectos relacionados, a obtenção de um parâmetro ocular necessário na técnica cirúrgica para substituição do cristalino por uma lente intraocular, sendo este o único atual método de tratamento para a doença. O parâmetro em questão é descrito como a curvatura da córnea que varia entre indivíduos e possivelmente até entre olhos de um mesmo indivíduo, fazendo-se necessário um método de aferição que seja eficaz e, ao mesmo tempo, cause o menor desconforto possível ao paciente. Para isso, o método escolhido foi o de vídeo-ceratometria, pois este tem caráter não invasivo e apresenta grande precisão e repetibilidade. Aliado ao estudo do método descrito, foi desenvolvido um protótipo de baixo custo capaz de abrigar a técnica, apresentando resultados comparáveis aos de aparelhos comerciais de alto nível. O baixo custo está relacionado à constituição das peças (impressão 3D) e ao processamento realizado por hardware comercial (Raspberry Pi), ambos cada vez mais acessíveis, assim como o desenvolvimento de software próprio utilizando algoritmos (2) relacionados à descrição matemática e uma rota de solução para o problema.

Palavras-chave: Vídeo-ceratometria. Caratara. IOL. Biômetro óptico.

Referências:

1 CONSELHO BRASILEIRO DE OFTALMOLOGIA. **Catarata**. Disponível em: <http://www.cbo.net.br/novo/publico-geral/catarata.php>. Acesso em: 16 jun. 2018.

2 van FORREST, N. **Fitting an ellipse to a set of data points**. Disponível em: <http://nicky.vanforeest.com/misc/fitEllipse/fitEllipse.html>. Acesso em: 15 fev. 2018.

PG1
"Rogue waves" via ruído do vácuo

AFONSO, R. J. S. [1]; MOUSSA, M. H. Y. [1]

ricardo.afonso@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Este projeto centra-se na interface de dois fenômenos da física de sistemas não-lineares: o problema de Fermi-Pasta-Ulam (FPU) e as "rogue waves" (RW). O problema de FPU consiste na simulação do análogo unidimensional de uma rede de átomos em um cristal (1), através de uma cadeia linear de partículas acopladas por molas que descritas pela lei de Hooke, mas considerando que a este acoplamento sejam adicionadas correções quadráticas ou cúbicas da força. Evidentemente, no caso em que apenas o acoplamento linear entre as partículas é considerado, a energia introduzida num dos modos normais da cadeia deve permanecer confinada a este modo. Contudo, no caso em que correções não-lineares são adicionadas ao acoplamento entre as partículas, espera-se que a energia introduzida num dos modos (pseudo) normais deve lentamente distribuir-se entre os demais modos, até que a equipartição da energia seja atingida como consequência da ergodicidade do sistema. Contrariando as expectativas de FPU, cálculos numéricos realizados por Mary Tsingou demonstraram que a energia introduzida no modo de mais baixa energia da cadeia retornava quase que completamente a este modo (com discrepância da ordem de 3%) após permanecer breve e aproximadamente num estado de equipartição da energia. (2) As rouge waves consistem em ondas gigantes que se formam em auto mar, sob condições climática adversas, a partir de mecanismos não-lineares de interferência entre ondas primárias de grandes intensidades. Neste projeto pretendemos acoplar os infinitos modos de uma cavidade, à semelhança do que ocorre no problema de FPU, através de termos lineares e correções não-lineares, estas implementadas, por exemplo, através de cristais ópticos não-lineares. O nosso objetivo consiste, basicamente, na implementação do efeito contrário ao que se observa no problema de FPU: popular com excitação considerável, ou uma rouge wave, um único modo da cavidade, ou um mesmo um conjunto delimitado de modos, a partir das excitações de ponto zero dos demais infinitos modos da cavidade. Este fenômeno visa a extração de energia do vácuo, e para a sua implementação devemos nos centrar na construção de equações diferenciais que acarretam as rouge waves de forma deterministas (3), um campo de pesquisa que vem, recentemente, atraindo considerável esforço da comunidade de sistemas não-lineares e apresentando resultados interessantes que corroboram a exequibilidade do presente projeto.

Palavras-chave: Rogue waves. Osciladores. Não-lineares.

Referências:

1 PONTE, M. A.; MIZRAHI, S. S.; MOUSSA, M. H. Y. State protection under collective damping and diffusion. **Physical Review A**, v. 84, n. 1, p. 012331-1-012331-5, July 2011.

2 FERMI, E.; PASTA, J.; ULAM, S. **Studies of nonlinear problems I**. Los Alamos: University of California, 1955. 20 p. Los Alamos report LA-1940.

3 BARONIO, F. et al. Solutions of the vector nonlinear Schrödinger equations: evidence for deterministic rogue waves. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 4, p. 044102-1-044102-4, July 2012.

PG2

Simulação via método de Monte Carlo dos efeitos microfísicos de colisão de prótons de radiações cósmicas com DNA, em ambiental espacial e planetário

AGUERA, J. J. M.[1]; GALANTE, D. [1]; MARINHO, F. [2]

jonjulion@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Instituto de Física - UFSCar Campus Araras

Prótons são os principais constituintes particulares das Radiações Cósmicas e do Vento Solar, e podem ser acelerados em fenômenos cósmicos galácticos (quasares e centros galáticos) ou estelares (Buracos Negros, Supernovas, Ejeções de massa coronal(CMEs) e Eventos de Prótons Solares(SPEs)), até energias nas quais se tornem radiações ionizantes. Caso consigam chegar até a superfície de planetas ou luas com a presença de vida biológica, como a conhecemos - baseada em água e codificada por DNA - podem colidir diretamente com as moléculas do DNA destes seres vivos , e causar danos diretos (Quebras de fitas simples e duplas: *SSBs* e *DSBs*; e formação de *Clusters*) ou com as moléculas de água do meio causando danos indiretos (formação de íons OH^{-1} e moléculas de H_2O_2 e H_2). Para estudar os efeitos das colisões de prótons com o DNA de organismos vivos e quantificação dos danos diretos e indiretos causados ao DNA, foram feitas simulações computacionais utilizando a plataforma Geant4-DNA (1), desenvolvida para a simulação dos danos causados ao DNA pela colisão de partículas com meios materiais usando o Método de Monte Carlo. As simulações foram realizadas considerando um volume alvo, chamado *phantom*, preenchido com água líquida de densidade 1,0 g/cm^3. Os danos diretos foram simulados usando um algoritmo de clusterização (2-3) presente no Geant4-DNA que mede o número de SSBs, DSBs, Tamanho de Cluster(nm) e Dose Absorvida(Gy) por próton lançado, enquanto que para a simulação dos danos indiretos foi usado um algoritmo que computa das reações químicas e também integra o Geant4-DNA. Os modelos matemáticos obtidos com as simulações procuram relacionar os danos diretos e indiretos com a energia cinética (entre 1keV e 50MeV) dos prótons primários incidentes. Para cada valor energia foram realizadas 5 mil simulações de eventos de lançamentos de prótons. Os resultados foram reunidos e analisados com softwares de visualização e ajuste de dados, e cada uma das quantidades de interesse mostrou ter uma distribuição de valores, em função da energia do próton, com um valor médio definido. Depois, pelos gráficos destas distribuições, foram obtidas curvas de ajuste que modelam matematicamente as distribuições dos valores médios, obtidos com as simulações, como funções da energia dos prótons primários lançados. Os modelos para as distribuições dos valores médios esperados das quantidades relacionadas aos danos, serão usados, posteriormente, com espectros reais do Sol e de estrelas em sistemas de exoplanetas como, por exemplo, o sistema Trappist-1, para prever o dano causado ao DNA de um organismo modelo, a bactéria *Deinococcus radiodurans,* e fazer estimativas sobre sua sobrevivência após a exposição a fluxos de prótons em ambientes planetários ou espaciais. Espera-se com isto contribuir para a ampliação do conhecimento científico sobre os efeitos danosos das colisões de prótons com o DNA e na sobrevivência de seres vivos microscópicos, assim como ajudar na pesquisa sobre a habitabilidade de planetas e luas do Sistema Solar e de sistemas exoplanetários.

Palavras-chave: DNA. Prótons. SSBs. DSBs. Cluster.

Referências:

1 BERNAL, M.A. et al. Track structure modeling in liquid water: a review of the Geant4-DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit. **Physica Medica**, v. 31, n. 8, p. 861-874, 2015.

2 FRANCIS, Z.; VILLAGRASA, C.; CLAIRAND, I. Simulation of DNA damage clustering after proton irradiation using and adapted DBSCAN algorithm. **Computer Methods and Programs in Biomedicine**, v. 101, n. 3, p. 265-270, 2011.

3 RAISALI, G. et al. Calculation of DNA strand breaks due to direct and indirect effects of Auger electrons from incorporated 123I and 125I radionuclides using the Geant4 computer code. **International Journal of Radiation Biology**, v. 89, n. 1, p. 57-64, 2013.

PG3

Estudo estrutural e funcional de hidrolases de glicosídeos celulossomais termofílicas envolvidas no processo de hidrólise de biomassa lignocelulósica

ALMEIda, L. R. [1]; SILVA, W. G. [2]; MUNIZ, J. R. C. [1]

al_leo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universidade Federal do ABC - UFABC

O esgotamento das reservas de petróleo, a crescente demanda energética de países emergentes e a necessidade de redução da emissão de dióxido de carbono sinalizam a importância pela busca de novas fontes de energias renováveis. Contudo, para que tais fontes tenham um caráter de efetiva substituição e não apenas de complementação, se fazem obrigatórias pesquisas por novas formas de se obtê-la. Assim, a produção do bioetanol mediante a hidrólise de biomassas lignocelulósicas, como do bagaço de cana-de-açúcar, tem recebido grande destaque (1). Devido ao seu potencial de evolução e redução de custos, a hidrólise enzimática da celulose pode ser uma peça fundamental para a produção de bioetanol de segunda geração a um custo competitivo em longo prazo. (1-2) Algumas bactérias termofílicas, como *Clostridium thermocellum*, produzem um complexo proteico multienzimático extracelular chamado celulossomo, que demonstra elevada capacidade de realizar uma eficiente degradação de biomassa celulósica, em especial na porção cristalina da celulose. (3) O objetivo principal desse projeto de pesquisa é caracterizar as enzimas β-glicosidases (BGls) celulossomais de C. thermocellum de diferentes famílias de hidrolases de glicosídeos (GHs), por meio de técnicas estruturais, bioquímicas e biofísicas. Parte disso já foi realizado até o momento para CtBGlu-GH1 e CtBGlu-GH3 (*C. thermocellum* BGL GH1 e GH3). E que isso permita comparar com outras BGls reportadas na literatura. Os genes CtBgl1A (*C. thermocellum* BGL GH1) e CtBgl3B (*C. thermocellum* BGL GH3) clonados, tiveram as proteínas expressas em Escherichia coli e até o momento apenas CtBGlu-GH3 foi purificada com sucesso após cromatografia de afinidade e de separação por massa molecular. A enzima purificada tem característica termofílica, mostrando alta atividade em temperatura acima de 60 °C em pH de 4,5-7,0. Apresentando maior atividade em pH 5,5 a 70 °C. Curiosamente apresentando temperatura de melting (tm) em 70 °C, determinados por meio de fluorimetria diferencial de varredura (DSF) e dicroísmo circular (CD). Além disso, teve avaliada sua atividade enzimática com os parâmetros de Michaelis-Menten: Km = 0,45 (mM), kcat = 201 (s-1), e Km/kcat = 444 (mM-1 s-1). Experimentos de DLS e SEC-MALS sugerem que em solução CtBGlu-GH3 pode ser encontrada nas formas de dímero e tetrâmero.

Palavras-chave: β-glicosidases (BGls) celulossomais. Clostridium thermocellum. Hidrólise de biomassas lignocelulósicas.

Referências:

1 LIU, J. et al. Systems integration for global sustainability. **Science**, v. 347, n. 6225, p. 963, 2015.

2 BORNSCHEUER, U. et al. Enzymatic degradation of (ligno)cellulose. **Angewandte Chemie,** v. 53, n. 41, p. 10876–93, 2014.

3 KAHN, A. et al. Evaluation of thermal stability of cellulosomal hydrolases and their complex formation.

In: LUBECK,M.(Ed) **Cellulases:** methods and protocols. New York, NY: Springer Verlag, 2018, p. 153–166.

PG4

Estudo do recobrimento biológico de nanossuperfícies por modelagem computacional: aplicação no desenvolvimento de imunonanossensores

AMARANTE, A. M. [1]; IERICH, J. C. M. [2]; GARCIA, P. S. [2]; MORAES, A. S. [2]; SOUZA, D. G. B. [3]; FRANCA, E. F. [4]; FREITAS, L. C. G. [5]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. [1]; LEITE, F. L. [2]

amarante_adriano2@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal de São Carlos - UFSCar, Sorocaba-SP

[3] Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho- UNESP, Botucatu-SP

[4] Instituto de Química - UFU

[5] Departamento de Química - UFSCar, São Carlos-SP

Neste trabalho foi desenvolvida uma nova metodologia de previsão de estrutura de anticorpos. O objetivo principal proposto do projeto é avaliar as forças intermoleculares provenientes das interações antígeno-anticorpo (funcionalizados em nanossuperfícies) relacionadas às doenças autoimunes, em especial, a Neuromielite Óptica (NMO). A metodologia foi aplicada na previsão da estrutura do biomarcador da NMO, o anti-aquaporina4 (anti-AQP4) (1). Com a modelagem molecular computacional (MMC) das nanossuperfícies funcionalizadas (recobertas) com o biomarcador e os cálculos de dinâmica molecular direcionada (SMD, do inglês, *Steered Molecular Dynamics*) (2), foi possível estimar a força de adesão teórica que está direcionando e corroborando experimentos envolvendo imunonanossensores de microscópio de força atômica (*AFM*, do inglês *atomic force microscope*) (3). Por fim, para comprovar o funcionamento dos imunonanossensores, foi desenvolvido um modelo estatístico para tratar e interpretar os dados experimentais, diferindo os pacientes soropositivos e soronegativos para determinados biomarcadores relacionados à NMO e a Esclerose Múltipla (EM), fornecendo assim um novo e mais preciso meio para diagnóstico de doenças desmielinizantes.

Palavras-chave: Modelagem molecular computacional. Atomic force microscope. Dinâmica molecular. Dinâmica molecular direcionada. Imunonanossensor. Aquaporina4. Anti-aquaporina 4.

Referências:

(1) WINGERCHUK, D. M. et al. The spectrum of neuromyelitis optica. **Lancet Neurology**, v. 6, n. 9, p. 805-815, Sept. 2007.

(2) IZRAILEV, S. et al. Steered molecular dynamics. In: DEUFHLARD, P. et al. **Computational molecular dynamics**: challenges, methods, ideas. Berlin: Springer-Verlag, 1999. p. 39-65. (Lecture Notes in Computational Science and Engineering, v. 4).

(3) LEITE, F. L. et al. Nanoneurobiophysics: new challenges for diagnosis and therapy of neurologic disorders. **Nanomedicine**, v. 10, n. 23, p. 3417-3419, Nov. 2015.

PG5
Supercondutores holográficos

APRILE, N. P. [1]; HARTMANN, B. [1]

nathaprile@yahoo.com.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Dualidade gauge/gravidade é uma classe de teorias em física que clama a equivalência entre alguma teoria quântica de campos e uma teoria quântica de gravidade. Umas das dualidades que ganharem destaque nos últimos anos foi a conjectura elaborada pelo Físico argentino Juan Maldacena em 1997 (1) intitulada AdS/CFT Correspondence. Aqui AdS significa espaço-tempo Anti-de Sitter, enquanto CFT significa teoria de campo confome. Desde o seu nascimento a conjectura AdS/CFT tem sido utilizada para descrever fenômenos de acoplamento forte na física da matéria condensada usando soluções de tipo buraco negro no AdS. Um exemplo é a descrição holográfica da supercondutividade em alta temperatura, em que, para tal, é necessário que do ponto de vista gravitacional um campo escalar carregado tenha comportamento não trivial próximo ao horizonte de eventos de um buraco negro no AdS, isto é, que o horizonte de eventos apresente de maneira espontânea uma quebra de simetria do tipo "Abelian gauge" e permita que o campo escalar carregado condense. (2) Estudamos aqui supercondutores holográficos em 3+1 dimensões longe do limite de prova, que é quando levamos em conta a back–reaction do espaço-tempo, além de considerarmos casos com soluções das equações de Einstein (Pura) e com a inclusão termos de correções gravitacionais chamados Gauss-Bonnet. (3)

Palavras-chave: Supercondutores holográficos. AdS/CFT correspondence. Dualidade gauge/gravidade.

Referências:

1 MALDACENA, J. The large-N limit of superconformal field theories and supergravity. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 38, n. 4, p. 1113-1133, 1999.

2 GUBSER, S. S. Breaking an Abelian gauge symmetry near a black hole horizon. **Physical Review D**, v. 78, n. 6, p. 065034-1-065034-7, 2008.

3 BRIHAYE,Y.; HARTMANN, B. Holographic superconductors in 3+ 1 dimensions away from the probe limit. **Physical Review D**, v. 81, n. 12, p. 126008-1-126008-7, 2010.

PG6

Physarum polycephalum: um modelo biológico de inteligência coletiva

AQUINO, L. F. [1]; FONTANARI, J. F. [1]

larissaaquino@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O Physarum polycephalum é um protista unicelular que se junta com outras células formando uma célula gigante onde milhares de núcleos compartilham uma parede celular e operam como uma entidade única. O plasmódio exibe uma rede dendrítica de estruturas tubulares (pseudópodos) que otimiza o transporte e distribuição de nutrientes. No ano 2000 um grupo de pesquisadores japoneses mostrou como esse organismo pode solucionar labirintos e encontrar uma malha de transporte eficiente e robusta a falhas que passa por pontos determinados (1-2). Já a modelagem matemática e computacional do Physarum, visto como um algoritmo de solução de problemas de otimização, ainda está em desenvolvimento. Dessa forma o Physarum constitui um exemplo biológico excepcional de como a inteligência coletiva pode emergir na natureza.Nossa abordagem ao movimento forrageiro do Physarum é pensá-lo como um processo de quimiotaxia, ou seja, um movimento em resposta a um gradiente químico. Essa abordagem foi usada na década de 70 para descrever o movimento de outro bolor limoso – o Dictyostelium discoideum – que, entretanto, não exibe a capacidade do Physarum de encontrar os caminhos ótimos entre fontes de alimentos, provavelmente por não produzir redes dendríticas (3). Para estudar a dinâmica do movimento forrageiro do Physarum vamos utilizar redes de mapas acoplados, nos quais tanto as variáveis espaciais como a temporal são supostas discretas. Essa abordagem permite a simulação eficiente dos mais diversos tipos de quimiotaxia e o estudo dos padrões espaciais formados pelo organismo virtual. Tomando-se os limites apropriados pode-se obter as equações diferenciais parciais que definem os modelos contínuos análogos aos mapas de rede.

Palavras-chave: Inteligência coletiva. Quimiotaxia. Mapas acoplados. Formação de padrões.

Referências:

1 NAKAGAKI, T.; YAMADA, H.;TOTH, A. Maze-solving by an amoeboid organism. **Nature, v.** 407, n.6803, p. 470, 2000.

2 TERO, A. et al. Rules for biologically inspired adaptive network design. **Science**, v. 327,n. 5964,p.439-442,2010.

3 KELLER, E.F.; SEGEL, L.A.Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability. **Journal Theoretical Biology**, v. 26, n.3, p.399-415, 1970..

PG7

Stochastic analysis of minimal models of negative feedback genetic networks

ARAUJO, G. D. [1]; MAIA, L. P. [1]

guilherme.david.araujo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Genetic expression and regulation in the single-cell level is intrinsically stochastic. Due to low molecular counts and random chemical reactions, intrinsic noise is a major feature to be controlled or explored by gene network designs. The levels of protein fluctuations inside a cell may determine its phenotype and fate through changes in its properties or structure, actions and decision making. Minimal models help with our understanding of the design principles featured in real biological networks. (1) Design principles can also have a role as building blocks of synthetic networks. In this work, we develop an analytic modeling of a minimal network of negative feedback through the stochastic approach of the chemical master equation for the probability density of protein levels. (2) We expand the nonlinear equation using Van Kampen's system size expansion and make connections to the deterministic limit. (3) We calculate steady-state noise levels (indexes of dispersion) in two models, of direct and indirect auto-regulation, and draw conclusions of noise control by the negative feedback; we found an optimal control level in the indirect auto-regulation system, a value of feedback strength that minimizes intrinsic noise. We also analyze the stochastic and deterministic connection near a Hopf bifurcation point, noting how a signature of bifurcation is manifested in the linear noise approximation of the stochastic system. The Hopf bifurcation allows the system to undergo sustained oscillations via limit cycles, which are robust to orbit perturbations. The deterministic version of the indirect model having a Hill feedback is called Goodwin Oscillator and is a minimal model proposed for sustained cellular oscillations.

Palavras-chave: Stochastic gene networks. Chemical master equation. System size expansion. Noise control. Hopf bifurcation.

Referências:

1 MACKEY, M. C. et al. The utility of simple mathematical models in understanding gene regulatory dynamics. **In Silico Biology**, v. 12, n. 1-2, p. 23-53, 2015.

2 SCHNOERR, D.; SANGUINETTI, G.; GRIMA, R. Approximation and inference methods for stochastic biochemical kinetics: a tutorial review. **Journal of Physics A**, v. 50, n. 9, p. 093001-1-093001-60, 2017.

3 VAN KAMPEN, N. G. **Stochastic processes in physics and chemistry**. 3rd ed. North Holland: Elsevier, 2007.

PG8

Propriedades eletrônicas e supercondutividade em quasicristais.

ARAUJO, R. N. [1]; ANDRAde, E. C. [1]

ronaldonasaraujo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Motivados por uma recente observação experimental de supercondutividade nos quasicristais (1), estudamos as propriedades eletrônicas dos mosaicos de Ammann-Beenker, ou octogonal, um exemplo de um quasicristal bidimensional para diferentes tamanhos aproximados. O modelo tight-binding resultante mostra uma DOS muito pontiaguda e um pseudogap em um preenchimento correspondente ao inverso do quadrado da relação prateada s. Este é um preenchimento relevante devido ao mecanismo Hume-Rothery que diz que a energia de Fermi de um quasicristal provavelmente caia sobre um pseudogap. Notavelmente, a função espectral mostra uma estrutura bem definida com "superfícies de Fermi" exibindo uma simetria rotacional de 8 vezes em torno desse preenchimento (2). Usamos o tensor de localização de Kohn e a razão de participação inversa para descrever a natureza dos auto-estados de partícula única, e descobrimos que esses estados são similares aos estados estendidos para a maioria dos recheios, exceto próximo ao pseudogap. Para estudar a supercondutividade, resolvemos as equações de Bogoliubov-de Gennes para aproximantes de diferentes tamanhos. Descobrimos que a teoria do BCS para sistemas não homogêneos é responsável pela maioria de nossas observações (3). Em seguida, executamos o dimensionamento de tamanho finito da amplitude do intervalo do parâmetro de ordem e mostramos que eles permanecem constantes, exceto no pseudogap, onde diminui com o tamanho do aproximante em valores pequenos da atração U. Isso está de acordo com as observações experimentais da Ref. (1), e mostram que, apesar de sua nova estrutura eletrônica, os quasicristais são propensos a exibir a supercondutividade convencional do tipo BCS.

Palavras-chave: Quasicristal. Propriedades eletronicas. Supercondutividade.

Referências:

1 KAMIYA, K. et al. Discovery of superconductivity in quasicrystal. **Nature Communication**, v.9, p.154, 2018.doi: 10.1038/s41467-017-02667.

2 ROTENBERG, E.; THEIS, W.; KORN, K. Electronic structure investigations of quasicrystals. **Progress in Surface Science,** v.75,n.3-8,p. 237–253,2004.

3 GHOSAL, A.; RANDERIA, M.; TRIVEDI, N. Inhomogeneous pairing in highly disordered s-wave superconductors. **Physical Review B**, v.65, n.1, p.014501, 1999.

PG9

Exploring structure-function relationships of glycoside hydrolases from families 9, 48 and 74

ARAÚJO, E. A. [1]; POLIKARPOV, I. [1]

evandroares@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Plant cell walls form a complex matrix composed mainly of cellulose, hemicellulose, and lignin. Cellulose is the main polysaccharide of the plant cell walls with high crystallinity and recalcitrance. Xyloglucan (XyG) is a complex polysaccharide involved in the control of cell expansion and biosynthesis of cell walls components. A complex crosslink between XyG and cellulose is mediated by H-bonds; consequently, an efficient hydrolysis of XyG and cellulose is a promising strategy to achieve an effective lignocellulosic biomass deconstruction by orchestrated action of CAZymes.(1-3) Here are described the functional and structural characterization of three novel enzymes belonging to glycoside hydrolase families 9 (*Bl*Cel9), 48 (*Bl*Cel48) and 74 (*Xc*GH74). *Xc*GH74 is a highly specific xyloglucanase from *Xanthomonas campestris*. During the XyG hydrolysis, XX and XG are its end products, which suggests that *Xc*GH74 can preferentially accept branched glucopyranosyl residues at both subsites -1 or $+1$. We also solved the structure of this enzyme and analyzed molecular reasons for its high permissibility in XyG recognition. These results suggest that *Xc*GH74 is able to cleave XyG preferentially between X-X motifs; however, it is unable to hydrolyze the polysaccharide between 'L-L' motifs where a side-chain substitution is a prerequisite to improved substrate recognition. The *Bl*Cel9 and *Bl*Cel48 are cellulases from *Bacillus licheniformis*. *Bl*Cel48 is catalytically stable in a broad range of temperatures and pH conditions, exhibiting hydrolytic activity against phosphoric acid swollen cellulose (PASC) and bacterial cellulose (BC). *Bl*Cel48 releases predominantly cellobiose, and also small amounts of cellotriose and cellotetraose as products from PASC with apparent processivity 4.6-times greater performance on BC than on PASC. Small-angle X-ray scattering (SAXS) data analysis revealed a globular molecular shape and monomeric state in solution. The crystal structure of *Bl*Cel48 was solved and used in presence of ligands spanning -5 to -2 and +1 to +2 subsites into the catalytic site. The specificity of the recognition of the cello-oligosaccharide was investigated by high-performance anion exchange chromatography (HPLC-PAD), protein crystallography, and statistical coupling analysis, which showed that this enzyme has an endo-like initiation on PASC. *Bl*Cel9 is a processive endoglucanase exhibiting maximum catalytic efficiency at pH 7.0 and 60°C, exhibiting highest hydrolytic activity against PASC, followed by BC, and to a lesser extent carboxymethylcellulose (CMC). The HPAEC-PAD analysis of the hydrolytic products demonstrated that the end product of the enzymatic hydrolysis is primarily cellobiose. SAXS and X-ray crystallographic data analyses revealed that this enzyme adopts a monomeric state in solution, as estimated from SAXS data; has an elongated shape composed of an N-terminal family 3 carbohydrate-binding module (CBM3c) and a C-terminal GH9 catalytic domain joined together by 20 amino acid residue long linker peptides. The domains are closely juxtaposed in an extended conformation and form a relatively rigid structure in solution, indicating that the interactions between the CBM3c and GH9 catalytic domains might play a key role in cooperative cellulose recognition. Together, these results shed some light on the structure-function relationship of glycoside hydrolases from families 9, 48 and 74.

Palavras-chave: X-ray crystallographic. Small-angle X-ray scattering . Carbohydrate-active enzymes. Plant cell walls. Biofuels.

Referências:

1 MEDIE, F. M. et al. Genome analyses highlight the different biological roles of cellulases. **Nature Reviews Microbiology**, v. 10, n. 3, p. 227, 2012.

2 CUSKIN, F. et al. How nature can exploit nonspecific catalytic and carbohydrate binding modules to create enzymatic specificity. **Proceedings of the National Academy**

of Sciences, v. 109, n. 51, p. 20889–20894, 2012.

3 SAKON, J. et al. Structure and mechanism of endo/exocellulase e4 from thermomonospora fusca. **Nature Structural and Molecular Biology**, v. 4, n. 10, p. 810, 1997.

PG10

On the parametrization of depth of maximum of ultra-high energy extensive air showers

ARBELETCHE, L. B. [1]; SOUZA, V. D. [1]

luan.arbeletche@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Observation of Ultra-High Energy Cosmic Rays (UHERC) plays a fundamental role on the contemporary scenario of multi-messenger astronomy. Lacking the possibility of direct detection of such particles, mostly because of the low flux, current observatories dedicate instruments for indirect observations based on the Extensive Air Showers (EAS). EAS are complex particle cascades induced by the interaction of the primary particle with the atmosphere. We contribute to this scenario by studying the longitudinal evolution of such particle cascades, i.e. the density of energy deposit along the shower trajectory. In particular, we will look at the distributions of depths of shower maximum (X_{max}), a quantity defined as the atmospheric depth at which a shower reaches its maximum energy deposit. Inside the range of possible observables, X_{max} is of central importance. Formerly, because such a quantity is known to be strongly associated to the mass composition of primary particles. Secondly, experimental facilities such as the Pierre Auger Observatory and the Telescope Array are capable to measure this quantity with very high precision in a shower-by-shower basis, thus allowing one to reconstruct not only the moments of X_{max}, but also to estimate its statistical distribution as a function of the primary energy.(1) Nevertheless, aiming to interpret X_{max} measurements, one has to know *a priori* what to expect in terms of a given primary configuration. Moreover, the statistical nature of this quantity as a global property of EAS reflecting microscopical characteristics of particle propagation and interactions is still undefined. Thus, X_{max} distributions are usually parametrized from a phenomenological perspective: one has to resort on statistical distributions based on their properties in order to fit X_{max} distributions. So far, two parametrizations have been proposed in the literature. The first is based on the physically motivated assumption that X_{max} is a sum of an exponential random variable and a gaussian one (EMG). (2) The second assumes a distribution from the statistics of extremes and considers its relation to the sum of non-identically distributed random variables (GG). (3) We check, between these two models, which is capable of giving a better description of X_{max} distributions coming from different primary particles and energies. We also propose two new parametrizations: the first is the shifted beta-exponential (BE) distribution, that appears as a generalization of GG parametrization; the second is the shifted log-normal (LN) distribution. Our results rely on the simulation of large samples (10^6) of EAS with the package CONEX and on the unbinned likelihood fits of X_{max} distributions in the ROOT analysis framework. We compare models by computing the relative likelihoods of each model given data. Our main achievements are to show that the EMG model has the worst fits for all energy and primaries and that, in general, the BE distribution has the best likelihoods. We also provide fits of the parameters of each studied distribution in terms of the primary mass and energy.

Palavras-chave: Ultra-high energy cosmic rays. Extensive air showers. Hadronic interactions.

Referências:

1 BELLIDO, J. et al. **Depth of maximum of air-shower profiles at the Pierre Auger Observatory: measurements above $10^{17.2}$ eV and composition implications.** Disponivel

em:<https://pos.sissa.it/301/506/pdf>. Acesso em: 11 set. 2018.

2 DE DOMENICO, M.; SETIMO, M.; RIGGI, S.; BERTIN, E. Reinterpreting the development of extensive air showers initiated by nuclei and photons. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 1307, p. 050,2013.doi:10.1088/1475-7516/2013/07/050.

3 PEIXOTO, C. J. T.; DE SOUZA, V.; BELLIDO, J. A. Comparison of the moments of the X_{max} distribution predicted by different cosmic ray shower simulation models. **Astroparticle Physics,** v. 47,p.18-30,2013./hrefhttp://dx.doi.org/10.1016/j.astropartphys.2013.05.011doi:10.1016/j.astropartphys.2013.05.011.

PG11

Purificação e caracterizaçãode biossurfactante produzidopor linhagem termofílica de Bacillus isolada de amostra rochosa de reservatório de petróleo

ARGENTIN, M. N. [1]; BOSSOLAN, N. R. S. [1]

marcela.argentin@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes (BS) são grupos heterogêneos de moléculas anfipáticas provenientes de metabolismo secundário microbiano que são capazes de reduzir a tensão superficial de líquidos ou formar emulsões estáveis, possuindo assim, uma ampla gama de aplicações industriais e ambientais. (1) Suas características físico-químicas sugerem vasta aplicação na indústria petrolífera, na limpeza de tanques estoque, biorremediação e dispersão em derramamentos de petróleo, bem como nos processos de recuperação de petróleo melhorada por microrganismo (MEOR). (2) Nesta técnica, os tensoativos (produzidos *in situ* ou incorporados no reservatório) atuam nas forças de capilaridade no interior das rochas, promovendo o escoamento do óleo através de seus poros, estimulando a produção de petróleo. (3) Entretanto, o potencial comercial dessas moléculas não pode ser totalmente explorado devido à falta de processos de purificação que sejam economicamente e ambientalmente viáveis.Neste contexto, este projeto propõe a extração, purificação e caracterização química de um tensoativo produzido por *B. alveayuensis,* uma linhagem termohalofílica isolada de amostra rochosa de um reservatório profundo da Bacia de Campos (RJ).O microrganismo estudado teve seu crescimento ótimo em Meio Mineral contendo glicerol e NH_4NO_3, na concentração de 70 g/L de NaCl, sem agitação e a temperatura de 55 ºC. O BS bruto foi obtido a partir de precipitação ácida (HCl 6M) com rendimento de 0,27 g/L, sua atividade foi determinada por índice de emulsificação (E_{24}) e tensão superficial (TS). Após a extração com clorofórmio, o BS foi semi-purificado em coluna de sílica gel 60 e usado para a caracterização química. A composição de aminoácidos foi determinada por HPLC, a quantificação de ácidos graxos por cromatografia gasosa e a estrutura química por espectroscopia de massas.O biossurfactante apresentou um teor protéico de 7%, com cadeira de ácidos graxos (C14 a C18) e homólogo C16 como o mais abundante. A presença de cadeia de ácidos graxos juntamente a aminoácidos indica que o BS pertence à classe dos lipopeptídeos, já os espectros de massa sugerem a presença de uma série homóloga e sua relação m/z indica possível presença de surfactinas e/ou iturinas. A etapa atual do trabalho consiste na seleção de protocolos experimentais para a realização de testes de atividade antifúngica, antitumoral e antimicrobiana com o BS purificado.

Palavras-chave: MEOR. Bioemulsificante. Termófilo.

Referências:

1 MUKHERJEE, A. K.; DAS, K. Microbial surfactants and their potential applications: an overview. In: SEN, R. (Ed.) **Biosurfactants**. New York: Springer, 2010. p. 54-64. (Advances in experimental medicine and biology, v. 672)

2 BANAT, I. M.; MAKKAR, R. S.; CAMEOTRA, S. S. Potential commercial applications of microbial surfactants. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 53, n. 5, p. 495-508, 2000.

3 LESLIE, T.; XIAO, H.; DONG, M. Tailor-modified starch/cyclodextrin-based polymers for use in tertiary

oil recovery. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 46, n. 4, p. 225-232, 2005.

PG12

Desenvolvimento de um método de observação contínua de oscilações de Bloch de átomos ultrafrios

MORENO,M. [1]; KESSLER, H. [1]; COURTEILLE, P.. W. [1]

michelle.moreno@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto do nosso laboratório consta de um gravímetro atômico de alta precisão para isso usamos métodos emprestados da interferometria atômica visando desenvolver um novo sensor inercial. Nos gravímetros atômicos atuais as oscilações são medidas através do estado dos átomos após um tempo de evolução variável, esta medição é destrutiva, e novas amostras atômicas devem ser preparadas para cada escolha do tempo de evolução. Para superar a natureza destrutiva das medições em gravímetros atômicos, propomos estudar uma nova técnica que permite monitorar as oscilações de Bloch ao vivo da dinâmica da onda de matéria de átomos de estrôncio, esta traduz a força de aceleração gravitacional numa medição da frequência de oscilações de Bloch de átomos refrigerados por laser e confinados numa onda de luz estacionária vertical (1). Dois ingredientes principais baseados em diferentes fenômenos físicos são necessários para a implementação deste monitoramento contínuo. O primeiro é o fenômeno das oscilações de Bloch, observadas no movimento de átomos resfriados para temperaturas abaixo do limite do recuo fotônico, colocados dentro de uma onda estacionária de luz e sujeitos à uma força externa,estes ocorrem com uma frequência estritamente proporcional à aceleração (2). O segundo ingrediente é o conceito do Laser por Recuo Atômico Coletivo (ou Collective Atomic Recoil Laser, CARL). Este efeito é observado com átomos frios interagindo com os dois modos contrapropagantes de uma cavidade óptica anular. Ele é devido à conversão de energia cinética dos átomos usada para criação de um campo de radiação laser contendo informação sobre o movimento atômico. Assim, o campo criado serve como prova não-destrutiva e contínua da dinâmica da onda de matéria e das forças inerciais aos quais está sujeita (3).A primeira parte do experimento baseia-se no resfriamento óptico do estrôncio que será realizado num processo de duas fases. Até agora, a primeira fase foi implementada e estamos trabalhando na segunda fase. Na primeira fase, átomos de estrôncio ejetados de um forno aquecido são desacelerados para alguns 10 cm/s numa armadilha magneto-óptica de duas dimensões (MOT-2D) e jogados para uma armadilha operada na transição forte A primeira parte do experimento baseia-se no resfriamento óptico do estrôncio que será realizado num processo de duas fases. Até agora, a primeira fase foi implementada e estamos trabalhando na segunda fase. Na primeira fase, átomos de estrôncio ejetados de um forno aquecido são desacelerados para alguns 10 cm/s numa armadilha magneto-óptica de duas dimensões (MOT-2D) e jogados para uma armadilha operada na transição forte $^1S_0$ -$^1P_1$ em 461 nm, com largura de linha de 32 MHz. Quando a armadilha é carregada com uma quantidade suficiente de átomos, os feixes de laser desta MOT (chamada MOT azul) são desligados e a segunda fase de resfriamento é iniciada. Esta consiste numa MOT (vermelha) operada na linha de inter-combinação $^1S_0$-$^3P_1$ estreita de 7.6 kHz em 689 nm. Temperaturas em torno de 1 μ K deveriam ser atingidas. A segunda parte do experimento refere-se a criação do potencial de Bloch e a medição das oscilações, para isso feixes de laser perto da ressonância em 689 nm são injetados nos dois modos contrapropagantes da cavidade, onde eles formam uma onda estacionária interagindo com os átomos. Dentro desta onda os átomos executam oscilações de Bloch que podem ser monitoradas continuamente através do batimento dos campos de luz vazando da cavidade e sobrepostos num fotodetector.

Palavras-chave: Átomos frios. Estrôncio. Resfriamento óptico. Oscilações de Bloch. Efeito CARL.

Referências:

1 FERRARI,G.; POLI, N.; SORRENTINO, F.; TINO, G.M. Long-lived Bloch oscillations with Bosonic Sr atoms and application to gravity measurement at the micrometer scale. **Physical Review Letters**, v. 97,n.6, p.060402, 2006.

2 DAHAN, M. B. et al. Bloch oscillations of atoms in an optical potential.**Physical Review Letters**, v. 76, n.24, p.4508,1996.

3 SAMOYLOVA, M. et al.Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity. **Optics Express,** v. 23, n.11,p.14823,2015.

PG13

An unified treatment for shock waves and immersed bodies in fluids

AURICHIO, V. H. [1]; CUCCHIERI, A. [1]; OLIVEIRA, M. L. B. de [2]

vinicius.aurichio@usp.br

[1]Instituto de Fisica de São Carlos - USP

[2]Instituto de Ciências Matemáticas e da Computação de São Carlos - USP

The study of fluids' movements—fluid dynamics—is a problem of interest tomany areas as fluids are present in almost every physical system. This is a specially difficult problem though because of the nonlinear nature of the governing equations of fluid dynamics, the Navier-Stokes equations. An example of complex behaviour arising from these nonlinearities is the formation of shock waves in high-speed flows, a region where properties of the fluid (e.g.density and pressure) have steep variations or are discontinuous and effectively become internal boundaries. Rawat and Zhong(1) implement a shock-fitting scheme, treating shocks as boundaries, that yields good results. A second difficulty is describing flows in complex geometries. Real systems,such as turbomachinery or airplanes, have intricate details that must be accounted for during simulation. A common approach to this problem is to build meshes that exactly match the boundaries of the system. Meshing is a difficult problem by itself and if the boundaries can move it is necessary to rebuild the mesh at every timestep. In 1972, seeking an alternative to avoid those problems, Peskin(2) proposed a method in which the solid bodies were described by a set of connected points, while the fluid was described by a fixed Cartesian grid. In our work, we extend the method proposed by Karagiozis et.al.(3) a variation of Peskin's method, by incorporating the shock-wave description used by Rawat. We can then handle both interfaces formed by shock waves and by solid bodies using a single method.

Palavras-chave: Immersed interface. Navier-Stokes equations. Computational fluid dynamics.

Referências:

1 RAWAT, P. S.; ZHONG, X.,On high-order shock-fitting and front-tracking schemes for numerical simulation of shock-disturbance interactions. **Journal of Computational Physics,**v.229, n.19, p.6744-6780, 2010. doi:10.1016/j.jcp.2010.05.021.

2 PESKIN, C. Flow patterns around heart valves: a numerical method. **Journal of Computational Physics**, v.10, n.2, p.252-271,1972. doi: 10.1016/0021-9991(72)90065-4.

3 KARAGIOZIS, K.; KAMAKOTI, R.; PANTANO, C. A low numerical dissipation immersed interface method for the compressible Navier-Stokes equations. **Journal of Computational Physics**,v.229, n.3, p.701-727, 2010, doi: 10.1016/j.jcp.2009.10.005.

PG14

Mudanças na energia livre associada ao movimento de domínios na UDP-N-Acetilglicosamina 2- epimerase de S. aureus

AZEVEdo, E.C. [1]; NASCIMENTO, A.S. [1]

erika.chang.azevedo@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A bactéria *Staphylococcus aureus* é uma das principais causas de infecções hospitalares em todo o mundo, onde mais da metade das cepas isoladas são identificadas como resistentes a antibióticos beta-lactâmicos. (1) A inibição de enzimas envolvidas na biossíntese da parede de ácidos teicóicos mostrou re-sensibilizar bactérias resistentes. A proteína MnaA (PDB 5ENZ) é uma UDP-N-acetilglicosamina (UDP-GlcNac) 2-epimerase que converte UDP-GlcNac em UDP-N-acetilmanosamina (UDP-ManNac) e vice-versa. Além de aumentar a eficácia de antibióticos beta-lactâmicos em células resistentes, a deleção desta enzima mostrou efeitos na formação de biofilme, aumentando a acessibilidade de fármacos à célula. (2) Estruturas cristalográficas mostram um movimento de abertura e fechamento entre domínios que é regulado pela ligação do substrato e do cofator UDP. Neste trabalho, estudamos a dinâmica de abertura/fechamento, a fim de mapear o perfil de energia livre para este movimento. Simulações de dinâmica molecular para a enzima não-ligada e para o complexo com UDP e UDP-GlcNac foram realizadas utilizando o campo de força FF14SB/GAFF, em um sistema NPT. Cargas HF/Resp foram computadas para os ligantes. Dinâmicas moleculares de equilíbrio e aceleradas (*Gaussian Accelerated Molecular Dynamics* ou GAMD e *Adaptively Biased Molecular Dynamics* ou ABMD) foram realizadas para amostrar os diferentes estados da dinâmica da proteína. Os perfis de energia livre para a enzima ligada e não-ligada foram construídos a partir das simulações ABMD e GAMD, onde a última mostrou resultados muito ruidosos. Foi possível observar uma mudança no mínimo de energia observado, influenciado pela presença dos ligantes no sítio ativo, indicando um aumento na estabilidade do estado fechado para a enzima ligada. A presença de uma região do sítio ativo contendo resíduos positivamente carregados influencia o movimento de abertura, por repulsão entre os aminoácidos, e a estabilização dos ligantes, por atração às suas cargas negativas.

Palavras-chave: Dinâmica molecular. MRSA. GAMD. ABMD.

Referências:

1 WEINER, . M. et al. Antimicrobial-resistant pathogens associated with healthcare-associated infections: summary of data reported to the National Healthcare Safety Network at the Centers for Disease Control and Prevention, 2011-2014. **Infection Control and Hospital Epidemiology**, v. 37, n. 11, p. 1288-1301, 2016.

2 MANN, P. A. et al. Chemical genetic analysis and functional characterization of staphylococcal wall teichoic acid 2-Epimerases reveals unconventional antibiotic drug targets. **PLOS Pathogens**, v. 12, n. 5, p. e1005585, 2016.

PG15

A phenomenological study of the boron-to-carbon ratio in the diffusive propagation of cosmic rays in the galaxy

BATISTA, P. I. S. [1]; VECCHI, M. [1]

pedro.ivo.batista@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Cosmic Rays (CRs) are charged particles, highly energetic that are produced and propagated through, and out of the Galaxy. There are two major open questions involving Cosmic Rays which are: its origin (production, acceleration and propagation) and its relevance in the total energetic balance of the universe. CRs are produced in astrophysical objects such as Supernova Remnants (SNR), Active Galaxy Nuclei (AGN), binary systems, although it cannot be confirmed that they are coming from these objects, despite recent coincident observations of neutrinos and gamma-rays from the direction of a blazar, an active black hole with its jet pointing towards the Earth (1). CRs sources do not have a definite answer because of the aspects involving CR propagation: the interstellar medium is very heterogeneously magnetized which causes CRs trajectories to be stochastic, therefore, making it impossible to confirm its real origin. Cosmic Rays are divided into two types: primaries (namely Hydrogen, Helium, Carbon and other nuclei, and lighter particles as electrons and even gamma rays), that are the ones produced and accelerated in the sources, and secondaries (namely Boron, Beryllium and Lithium nuclei and anti-matter), that are products of the interaction of the primaries with the interstellar medium and other CRs, i. e., not accelerated in the sources. A notable property of the CR spectrum is its power-law behavior over many decades in energy. This behavior is coupled with another feature of CR's study that is their detection. The wide range of variation of the flux makes possible the direct measurement of low energy CRs while the highest energy ones are only detected thanks to the byproducts from their interactions with the atmosphere. This work is focused on the on CRs within the energy range of 1 GeV to $1 \sim 3$ TeV that is the energy in which the flux is composed mainly by galactic CRs, and is the energy of operation of the AMS experiment. As technology improves with time, experiments become more precise and unveil new questions. The AMS-02 (Alpha Magnetic Spectrometer) is a successful experiment on Cosmic Ray detection that brought fresh hadron and lepton flux data, showing unexpected behaviors. Since a break in the spectral index in the flux of primary species was observed (2), many hypotheses came up trying to explain this anomaly and in particular the break as a diffusive effect (3), which is the primary subject of this work. This is a work towards the study of the boron-to-carbon flux ratio as a tool for analyzing several models of cosmic ray transport in the galaxy using the semi-analytical code USINE.

Palavras-chave: Cosmic rays. Boron-to-carbon. Astroparticle physics.

Referências:

1 ICECUBE COLLABORATION. Neutrino emission from the direction of the blazar TXS 0506+056 prior to the IceCube-170922A alert. **Science**, v. 361, n. 6398, p. 147-151, July 2018. doi: 10.1126/science.aat2890.

2 AGUILAR, M. et al. Precision measurement of the proton flux in primary cosmic rays from rigidity 1 GV to 1.8 TV with the alpha magnetic spectrometer on the international space station. **Physical Review Letters**, v. 114, n. 17, p. 171103-1-171103-9, Apr. 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.171103.

3 GÉNOLINI, Y. et al. Indications for a high-rigidity break in the cosmic-ray diffusion coefficient. **Physical Review Letters**, v. 119, n. 24, p. 241101-1-241101-6, Dec. 2017. doi: 10.1103/PhysRevLett.119.241101.

PG16
Propriedades termodinâmicas de horizontes causais

BARBOSA, M. G. [1]; VANZELLA, D. A. T. [1]

matheusgb@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

No período conhecido como "era de ouro da física de buracos negros", em meados da década de 60 e início da de 70, muitos resultados relativos às propriedades destes corpos surgiram, assim como as primeiras indicações de sua real existência, através da observação de fontes intensas de raios X, e as quatro leis de sua mecânica, análogas às leis da termodinâmica, propostas em 1973 por Bardeen, Carter e Hawking. (1) Apesar desta analogia, era questionável se esta relação seria apenas uma coincidência puramente matemática ou se elas realmente representavam uma conexão entre os dois campos de estudo. Um ponto importante nesta discussão era o fato de buracos negros, classicamente, não poderem ter uma temperatura diferente de zero, dado que qualquer partícula ou radiação em seu horizonte de eventos tem como único futuro possível permanecer na região definida por ele, logo, nada deveria ser emitido dele de forma a definir uma temperatura. Esta questão foi resolvida por Hawking (2) ao mostrar que os efeitos quânticos do vácuo nas vizinhanças do horizonte de eventos possibilitam a emissão de partículas, definindo assim uma temperatura não nula para o buraco negro. Devido à perda de energia relacionada às partículas emitidas, a área do horizonte de eventos pode diminuir, em contradição com a segunda das leis mencionadas anteriormente. Para contornar este problema, formulou-se então a chamada a segunda lei generalizada da termodinâmica, permitindo assim uma interpretação física de equivalência entre as leis da mecânica de buracos negros e a termodinâmica. Sendo os horizontes de eventos descritos pela geometria do espaço-tempo em estudo, é razoável questionarmos se outras geometrias ou entidades geométricas também possuem algum tipo de relação com a termodinâmica. Um exemplo surge no efeito Unruh, onde é possível definir uma temperatura, de forma semelhante à temperatura de um horizonte de eventos, ao horizonte causal de um observador acelerado, mesmo este se encontrando em um espaço-tempo plano. Horizontes causais definem o domínio causal de um observador, como os chamados cones de luz, e são representados por hipersuperfícies nulas. Por isso, o presente estudo busca encontrar possíveis relações entre as propriedades geométricas desta classe de superfícies e conceitos termodinâmicos.

Palavras-chave: Relatividade geral. Termodinâmica de buracos negros. Horizontes causais.

Referências:

1 BARDEEN, J. M.; CARTER, B.; HAWKING, S. W. The four laws of black hole mechanics. **Communications in Mathematical Physics**, v. 31, n. 2, p. 161-170, 1973.

2 HAWKING, S. W. Particle creation by black holes. **Communications in Mathematical Physics**, v. 43, n. 3, p. 199-220, 1975.

PG17
Estimação de parâmetros em sistemas quânticos

BARRETO, D. L. [1]; SOARES-PINTO, D. O. [1]

diogolbar@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A metrologia quântica, formalmente chamada de estimação de parâmetros quântica, já havia sido explorada na década de 70 (1), mas só voltou a atrair grande interesse dos cientistas nas últimas duas décadas. Os avanços tecnológicos e teóricos na mecânica quântica abriram novas possibilidades e permitiram que os pesquisadores passassem a utilizar propriedades quânticas da matéria para criar protocolos de estimação muito mais precisos que seus predecessores clássicos. (2) Todos estes esforços culminaram com a detecção das ondas gravitacionais em 2016 através da utilização das propriedades quânticas da luz e o uso de um protocolo quântico de alta precisão. Diante dos recentes desenvolvimentos nesta área decidimos tentar contribuir para ela de alguma forma, focando principalmente nos protocolos quânticos utilizando sistemas de spin 1/2 (qubits) que podem ser facilmente manipuláveis através da utilização de técnicas de Ressonância Magnética Nuclear. A teoria da metrologia quântica já é bem estabelecida para o caso de sistemas fechados, o que fez voltarmos nossas pesquisas para sistemas abertos e sistemas não-hermitianos (e.g. , sistemas que obedecem simetria-PT). Para o caso de sistemas abertos trabalhamos com sistemas de 1 a 3 qubits em contato com um banho térmico e estudamos como a presença de um campo estocástico (3) poderia influenciar o limite de precisão de medidas feitas no sistema.

Palavras-chave: Informação quântica. Metrologia quântica. Sistemas abertos.

Referências:

1 HELSTROM, C. W. **Quantum detection and estimation theory**. New York: Academic Press, 1976. (Mathematics in science and engineering, v. 123).

2 PARIS, M. G. A. Quantum estimation form quantum technology. **International Journal of Quantum Information**, v. 7, supp. 01, p. 125-137, 2009,

3 COSTA FILHO, J. I. et al. Enabling quantum non-Markovian dynamics by injection of classical colored noise. **Physical Review A**, v. 95, n. 5, p. 052126-1-052126-13, 2017.

PG18

Ab-initio investigation of structural stability and exfoliation energies in transition metal dichalcogenides based on Ti-, V-, and Mo-group elements

BASTOS, C. M. O. B. [1]; BESSE, R. [1]; SILVA, J. L. F. da [2]; SIPAHI, G. M.[1]

cmobastos@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Intituto de Química de São Carlos - USP

The layered materials are knowns of 50 years, but recently, have attracted the attention due to wide new applications, e.g. supercapacitors and batteries, and the capacity of being isolated in one layer. A particular class are transition metal dichalcogenides (TMDs) (1), with formula MQ2, combining transition metals (M) with S, Se and Te. This class of materials has a wide spectrum of electronic properties, e.g. emiconductors and metals materials, and magnetic ordering as antiferromagnetic. Also, the same composition can be present the different properties, depending on the polymorphic phase. However, for the most part of ompounds, only the most stable polymorphic phases are synthesized. Also, the advances of new synthesis techniques are allowing the synthesis of metastable phase. Here, we perform a ab-initio investigation, using density functional theory (DFT), of the structural, energetic and electronic properties for Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo and W combining with S, Se and Te in three polymorphic phases: trigonal prismatic (2H), octahedral (1T) and distorted octahedral (1Td). In the structural properties, has been observed which 1Td exist for a small number of the compounds. Also, we identified the magnetic compounds and calculated the exfoliation energy indicating the potential candidates to form one layer material. Likewise, we identify a trend between the effective Bader charge in the metal with exfoliation energy, suggesting with some materials have a small exfoliation energy due to Coulomb repulsion between chalcogen plans. Last, we analyze the electronic properties, identifying the semiconductors, semimetals and metals materials and predicting the band gap of semiconductors (2). In our results, the dependence of d-orbital for the band gap is explicit. Therefore, we investigate the properties of stable and metastable phases for a large set of TMDs materials, allowing the development of new TMDs applications.

Palavras-chave: Density functional theory. Transition metal Dichalcogenides. Exfoliation energy.

Referências:

1 MANZELI, S. et al. 2D transition metal dichalcogenides. **Nature Reviews Materials**, v.2, p.17033, 2017./hrefhttp://dx.doi.org/10.1038/natrevmats.2017.33doi:10.1038/natrevmats.2017.33.

2 BASTOS, C. M. O.et al. Ab-initio investigation of structural stability and exfoliation energies in transition metal dichalcogenides based on Ti-, V-, and Mo-Group elements. **In preparation**.

PG19

Free living amoeba diversity on Monjolinho river at state of São Paulo and Naegleria gruberi as a model to selenocysteine (SEC) pathway study

BELLINI, N. K. [1]; FONSECA, A. L. M. [1]; THIEMANN, O. H. [1]

nkbellini@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The protists grouped into Free Living Amoeba (FLA) have a worldwide distribution, which genera *Naegleria*, *Acanthamoeba*, *Sappinia* and *Balamuthia* are capable of causing infections affecting humans, mainly encephalitis leading to death in less than a week since the beginning of the symptoms. (1) To date, South American countries have a lack of FLA's occurrence reports (2) motivating this research aimed on identifying the environmental occurrence of FLA in a public freshwater, the Monjolinho river at São Carlos – São Paulo, Brazil. The methodology adopted to address this goal includes a limnological water characterization, besides the morphological and molecular analysis. The latter is going to be performed using a set of 18S rDNA primers for both global (FLA group) and genus specific sequencing. Hitherto, by Sanger sequencing, *Naegleria gruberi* has been encountered in the most eutrophic collection site. Regarding the morphological assays, after filtering the water through a 0.45$\alpha\mu$ m membrane, pieces of the membrane were transferred onto non-nutrient agar plates cultivated under a range of temperature (26, 37 and 44º C). The isolated trophozoites have been observed with scanning electron microscopy (SEM), besides staining methods for optical microscopy which taxonomic identification will be confirmed in the Page's key. To enlarge the biological knowledge on these amoeba, we have been used *N. gruberi* as a model of study targeting the selenocysteine (Sec) pathway whose semimetal selenium, requested to its formation is likely available at freshwater systems. All genes have already been identified into *N. gruberi* genome (3), although the two isoforms of selenophosphate synthetase (SPS2) protein remains few comprehended. SPS2 converts selenite and adenosine triphosphate (ATP) into selenophosphate, required for the Sec synthesis. To perform a SPS2a and SPS2b isoforms analysis and inspect whether they present the ability of hydrolyzing ATP, both enzymes have been cloned into pET32a and *E.coli* Bl21(DE3) to be expressed and purified. Thus, we have performed ATPase activity assay using ATP as substrate and quantifying the AMP production through high-performance liquid chromatography (HPLC) which results have revealed that both are capable of hydrolyzing ATP. Additionally, the *N. gruberi* culture have been submitted to selenium supplementation (5$\alpha\mu$ M) with and without hydrogen peroxide (200α μ M) stress, to investigate any SPS2 in vivo modulation. Imunoassays have been used to assess protein expression and its cellular location, together SEM to observe possible morphological changes after the cellular treatments. The results obtained so far revealed a cell density increase in stressed cultures with extra selenium input as stated by the growth curves. This behavior may be related to the protein modulation due to SPS2 bands being 34% more intense in stressed samples with selenium, by western blot. SEM and immunofluorescence images of healthy cultures have been used for comparison against images of stressed cells. All these results might extend the comprehension of SPS2 role in selenocysteine pathway, besides to enhance the morphological characterization of *N. gruberi*, likely one of the FLA's species encountered at Monjolinho river.

Palavras-chave: Free living amoeba. Monjolinho river. Naegleria gruberi. Selenocysteine.

Referências:

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

2 DE JONCKHEERE, J. F. Origin and evolution of the worldwide distributed pathogenic amoeboflagellate *Naegleria fowleri*. **Infection, Genetics and Evolution**, v. 11, n. 7, p. 1520-1528, Oct. 2011.

3 DA SILVA et al. Selenocysteine biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 188, n. 2, p. 87-90, Apr. 2013.

PG20

Exploration of two-dimensional late transition metal dichalcogenides with density functional theory

BESSE, R. [1]

rafael.besse@usp.br

DA SILVA, J. L. F. [2]

LIMA, M. P. [3]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Química de São Carlos - USP

[3] Departamento de Física - UFSCar

Over the past decade, transition metal dichalcogenides (TMDs), materials with chemical formula MQ_2 (M = transition metal, Q = S, Se, Te), have attracted great interest due to the obtainment of unique properties with two-dimensional TMDs, indicating great potential for several applications, such as electronics, catalysis and energy storage. (1-2) TMDs with M from groups 4 to 6 have layered crystal structures and have been extensively explored as 2D materials, however a large diversity of crystal structures is observed for compounds with M from the remaining groups, for example, among the group 9 TMDs, only the tellurides have been observed in layered crystal structures. (1) Therefore, in order to enhance the development of two-dimensional materials based on TMDs and explore their properties, we performed a density functional theory investigation of the properties of MQ_2 compounds based on late transition metals (M = Fe, Co, Ni, Cu, Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, Au). Our calculations were performed with the Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP) employing the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange correlation functional and the D3 van der Waals correction. For every composition, the equilibrium geometric parameters were determined for 11 different crystal structures, including both layered and non-layered TMDs structures that were already experimentally observed. Calculated lattice parameters have an average relative difference to available experimental data of 1.1%. Based on the total energy, we determined the relative stability of crystal structures, showing that layered crystal structures are the most stable for compounds of group 10 metals, and that among the layered type structures, the ones with intralayer arrangements of octahedral and distorted octahedral coordination predominate as the lowest energy phases. The increase of the chalcogen atomic radius energetically favors the layered structures, which is also observed when going from Fe to Ni group metals. To evaluate the strength of interlayer binding, we obtained the exfoliation energies of the lowest energy layered crystals, which range from 12 to 55 meV/Å^2, and the strong binding of group 11 compounds ($>$ 37 meV/Å^2) likely indicates large contribution of non van der Waals bonding between layers. In order to explore the electronic properties of the selected TMDs and understand how they are affected by the structure dimensionality, calculations and analysis of the electronic band structures are currently in progress.

Palavras-chave: Transition metal dichalcogenides. Two-dimensional materials. Density functional theory.

Referências:

CHHOWALLA, M. et al. The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets. **Nature Chemistry**, v. 5, n. 4, p. 263-275, 2013. doi: 10.1038/nchem.1589.

MANZELLI, S. et al. 2D transition metal dichalcogenides. **Nature Reviews Materials**, v. 2, p. 17033,

2017. /hrefhttps://doi.org/10.1038/natrevmats.2017.33doi.org/10.1038/natrevmats.2017.33.

PG21

Estudos das propriedades de vórtices em Condensados de Bose-Einstein com interação dipolar

BIRAL, E. J. P.. [1]; SANTOS, F. E. A. . S. [2]

eliasbiral@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Departamento de Física - UFSCar

Condensados de Bose-Einstein (CBE) possuem muitas propriedades interessantes que são ativamente estudadas pelos físicos, uma dessas que se destaca é o aparecimento de vórtices. Com o crescimento da utilização de átomos frios para modelar CBE houve um aumento de interesse pela área nos últimos anos (1). O comportamento dos vórtices quantizados em relação aos parâmetros físicos em questão ainda permanece um desafio tanto para a descrição teórica como para realização experimental em vários sistemas (e.g. sistemas binários, cruzamento de CBE com supercondutores BCS, condensados de bósons alcalinos). Neste trabalho, estudamos a presença de vórtices quantizados em gotas autossustentadas com interação dipolar. Descrevemos regiões energéticas de alta estabilidade, discutimos as configurações de parâmetros para obtenção dos vórtices e mostramos que os valores encontrados são experimentalmente viáveis. Utilizamos métodos analíticos variacionais com o funcional de Gross-Pitaevskii e correções quânticas como as de Lee Huang Yang em conjunto com simulações de longa escala tridimensionais em tempo real(2). Também procuramos generalizar o trabalho de (3) para incluir vórtices multicarregados. Desse modo, buscamos estabelecer na física de vórtices uma base teórica mais robusta em um campo de ponta que mantém contato significativo com os experimentos atuais visando uma ampla aplicação dos CBE no entendimento da natureza e no possível desenvolvimento de novas tecnologias.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstei. Vórtices. Interação dipolar.

Referências:

1 LI. Y.; MARTONE, G. I.; STRINGARI, S. Spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates. **Chinese Physics B**,v.24, n.9, p.090308, 2015.

2 WILSON, R. M.; RONEN,S.; BOHN, J. L. Stability and excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate with a vortex. **Physical Review A**, v. 79, n.1,p.013621, 2009.

3 CIDRIM, A., et al.Vortices in self-bound dipolar droplets. **Physical Review A**, v. 98, n.2, p.023618, 2018.

PG22

Complex networks in medical image analysis: osteoarthritis application

BRAZ, D. C. [1]; BRUNO, O. M. [1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. [1]

dcbraz@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Scientific and technological research on digital imaging techniques and systems, in its various modalities and configurations, plays an important role in improving health care and increasing human longevity. Specifically, the development of computational vision techniques and systems for information extraction and processing aid has contributed to the work of radiologist physicians in improving various elements related to medical imaging diagnosis. In this context, the objective of this work is the presentation of the initial results and the perspectives of the ongoing doctoral project that aims at the study and development of complex networks for computational vision, with application of complex network metrics and properties (1) in the analysis of medical images. At the present moment, a first application is being developed involving the texture analysis (2) of knee radiography images of patients with and without osteoarthritis (3), in partnership with the research group of the I3MTO Laboratory of the University of Órleans (France). Osteoarthritis is a disease that affects a significant number of people, especially in more advanced ages, and that produces changes in the structure and functioning of the joints (shoulders, knees, etc.), bringing pain and limitations of the movements of these joints. The initial results of this application, in comparision with other works (3), indicate good perspectives for the development of the doctoral project and its contribution in relation to the thematic of the analysis of medical images.

Palavras-chave: Medical images. Complex networks. Data science. Machine learning.

Referências:

1 NEWMAN, M. E. J. **Networks**: an introduction. New York: Oxford University Press, 2010. 772 p.

2 BACKES, A. R.; CASANOVA, D.; BRUNO, O. M. Texture analysis and classification: a complex network-based approach. **Information Sciences**, v. 219, p. 168-180, Jan. 2013. doi: 10.1016/j.ins.2012.07.003.

3 RIAD, R. et al. Texture analysis using complex wavelet decomposition for knee osteoarthritis detection: data from the osteoarthritis initiative. **Computers and Electrical Engineering**, v. 68, p. 181-191, May 2018. doi: 10.1016/j.compeleceng.2018.04.004.

PG23

Novas plataformas para o diagnóstico rápido e precoce do Mal de Alzheimer

BRAZACA, L. C. [1];MORETO, J. R. [2];WANG, J. [3];ZUCOLOTTO, V. [1]

lais.brazaca@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Estadual de San Diego - SDSU

[3] Universidade da Califórnia - UC

O mal de Alzheimer é a doença degenerativa mais comum do mundo, afetando atualmente 36 milhões de pessoas. (1) Esta é causada pelo acúmulo, nos neurônios, de placas proteícas formadas por fragmentos de β -amilóide e pela formação de aglomerados da proteína Tau. (2) Estes complexos afetam o funcionamento dos neurônios principalmente através da interrupção de estímulos nervosos ou levando à morte celular. (3) O diagnóstico preciso da doença ainda é uma tarefa complexa, dependendo de análises piscicológicas atuando em conjunto com técnicas de imagem ou análises do líquido cefalorraquidiano. O conjunto de técnicas utilizado para o diagnóstico preciso ainda é de difícil acesso à grande parte da população devido ao seu alto custo e necessidade de equipamentos e pesquisadores especializados. Dessa maneira, o desenvolvimento de ferramentas simples e de baixo custo que auxiliem no diagnóstico do mal de Alzheimer é de alto interesse à sistemas de saúde. Propomos o desenvolvimento de um biossensor eletroquímico baseado em papel para quantificação simultânea de 3 biomarcadores sanguíneos do mal de Alzheimer - Fetuína B, Clusterina e Precursor do Hormônio Pancreático. Para isso, são utilizados anticorpos específicos para cada uma das proteínas marcados com nanopartículas de ouro (AuNPs) e plataformas microfluídicas baseadas em membranas de nitrocelulose, celulose e fibra de vidro. As AuNPs são posteriormente quantificadas através de técnicas eletroquímicas e/ou colorimétricas. No caso da detecção eletroquímica, são utilizados eletrodos *screen-printed* caseiros de carbono em conjunto com a técnica de voltametria de redissolução e os reagentes Br_2/HBr para a oxidação do metal. Até o presente momento, obteve-se uma curva de calibração com boa linearidade (R^2 = 0,998) para concentrações de AuNP-Ab de até 0,1 (concentração relativa relacionada à diluição de 10x). A detecção mostrou alta sensibilidade e reprodutibilidade, com limite de detecção de 0,04 (concentração relativa relacionada à diluição de 25x). No caso da detecção colorimétrica, utiliza-se uma câmera semi-profissional para obter fotos do dispositivo alguns minutos após a aplicação da amostra e um software desenvolvido por nós em Matlab para sua análise. A detecção colorimétrica mostrou boa linearidade para diluições de AuNP-Ab de até 0,1 (concentração relativa relacionada à diluição de 10x) (R^2=0,991), assim como para concentrações de Fetuína B de 1 a 500 nM (R^2=0,978), com limite de detecção de 0,09 nM. Como próximo passo do desenvolvimento do projeto esperamos relacionar as concentrações de AuNPs e dos demais biomarcadores da doença utilizando ambas as técnicas de quantificação. Em seguida, a plataforma desenvolvida será testada em amostras de plasma de pacientes em diferentes condições de saúde: saudáveis, com o mal de Alzheimer, e em estágio de declínio cognitivo inicial. Espera-se que o desenvolvimento destes dispositivos auxilie no aumento da precisão e do número de diagnósticos do Mal de Alzheimer, especialmente em casos precoces – abrindo caminho para mais estudos sobre o mecanismo de ação da doença e gerando informações importantes para a elaboração de novos tratamentos ou até mesmo para o encontro da cura.
Agradecimentos: FAPESP (2015/02623-0; 2017/03779-0) e CNPq (140625/2015-1).

Palavras-chave: Mal de Alzheimer. Biossensor. Lateral-flow. Microfluídica. Papel.

Referências:

1 SAYEG, N. Quantas pessoas sofrem de Alzheimer no mundo e no Brasil? **AlzheimerMed**: informação &; solidariedade. Disponível em: <http://www.alzheimermed.com.br/perguntas-e-respostas/quantas-pessoas-sofrem-de-doenca-de-alzheimer-no-mundo-e-no-brasil>. Acesso em: 23 ago. 2018.

2 HUANG, Y. D.; MUCKE, L. Alzheimer mechanisms and therapeutic strategies. **Cell**, v. 148, n. 6, p. 1204-1222, 2012.

3 ALZHEIMER'S ASSOCIATION. **Inside the brain**: a tour of how the minds works. part 1: brain basics. Disponível em: <http://www.alz.org/alzheimers_disease_4719.asp>. Acesso em: 23 ago. 2018.

PG24

Estudos de relações entre estrutura e função de xilose isomerase

BRIGANTI, L. D. B. [1]; POLIKARPOV, I. [1]

lorenzo_briganti@outlook.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A indústria sucroalcoleira, tradicional e consolidada, em especial no Brasil, apresenta-se como uma alternativa energética menos nociva em comparação a indústria petroleira. Entretanto, sua produtividade apresenta uma barreira em seu crescimento. A produção brasileira praticamente estagnou desde 2008, por diversos motivos: consecutivas quebras de safra, queda nos preços e limitações operacionais. Em relação a esse último ponto, podemos ressaltar a limitação causada pela matéria-prima (cana-de-açúcar), onde 1 tonelada de cana gera, aproximadamente, 90 L de etanol e 280 Kg de bagaço (1). Apesar de existir pesquisas de melhoramento genético do vegetal para aumentar a produção de caldo, o bagaço produzido continua sendo sub-aproveitado na indústria.Uma das estratégias propostas é a produção de Etanol de 2ª geração (E2G), ou seja, produzido à partir de sobras da produção primária (como bagaço, palha e pontas do vegetal). No bagaço, por exemplo, cerca de 28% da sua constituição é hemicelulose, cujo composto majoritário é a xilose (2).A Xilose é uma aldose que não é fermentada naturalmente por *Saccharomyces cerevisiae*. Isto significa que é necessária a conversão a Xilulose (Cetose) para que a fermentação ocorra. Essa conversão se dá, entre outras formas, através da enzima Xilose Isomerase (XI), presente em diversos organismos (3). Ela é atualmente usada na produção de High Fructose Corn Syrup (HFCS), ingrediente muito importante na indústria alimentícia, e pode ser usada na produção de E2G. Dada a importância econômica dessa enzima, o objetivo do presente estudo é identificar e caracterizar bioquimica e estruturalmente XIs com potencial interesse industrial. Até o presente momento, uma XI de um microorganismo marinho foi caracterizada bioquimicamente, por SAXS, e estruturalmente também. Os próximos passos serão no sentido de caracterizar enzimas de outros organismos e realizar alguns estudos mais detalhados.

Palavras-chave: Xilose isomerase. SAXS. Estrutura.

Referências:

1 RENEWABLE FUELS ASSOCIATION.RFA. **Leading the U. S. ethanol industry.** Disponível em:< www.ethanolrfa.org>. Acesso em: 20 ago.2018.

2 REZENDE, C. A.et al.Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology for Biofuels, v.** 4, p. 54, 2011.doi.org/10.1186/1754-6834-4-54.

3 ASBÓTH, B.; NÁRAY-SZABÓ, G. Mechanism of action of D-xylose isomerase. **Current Protein Peptides Science, v.** 1, n.3, p. 237-254,2000.

PG25

Influência da mutação T282Y na termoestabilidade do heterodímero SEPT7-SEPT3

BROGNARA, G. [1]

gabriel.brognara@usp.br

ARAÚJO, A. P. U. de [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas que se ligam aos nucleotídeos de guanina, muitas sendo capazes de hidrolisá-lo, e estão envolvidas em diversas funções celulares nas quais se encontram associadas à membrana plasmática, como a citocinese, a exocitose, a fagocitose, o tráfego de vesículas. Essas proteínas já foram descritas em muitos organismos como leveduras, platelmintos, artrópodes e mamíferos, sendo conservadas em metazoários e fungos, embora estejam ausentes em plantas. A principal característica das septinas reside na sua polimerização, fato que promove a formação de complexos heteroligoméricos altamente organizados, que podem resultar em estruturas do tipo filamentos, anéis e redes. (1) Atualmente, o complexo de septinas humanas melhor caracterizado é um hexâmero formado pelas septinas humanas SEPT2, SEPT6 e SEPT7. (2) Entretanto, diversos estudos mostram que o complexo fisiológico pode possuir ainda a SEPT9 nas suas extremidades, formando um octâmero. A similaridade na estrutura primária, compartilhada entre as 13 septinas humanas, permite que as mesmas sejam classificadas em 4 subgrupos, representados por cada uma dessas proteínas presentes nesse octâmero. Desde modo, uma das possíveis combinações do complexo é feita realizando simplesmente a troca da SEPT9 pela SEPT3 (que pertencem ao mesmo subgrupo), estabelecendo-se uma interação entre a SEPT7 e SEPT3. Além disso, sabe-se que a mutação T282Y na SEPT3 é fundamental no processo de homodimerização. (3) Deste modo, no presente projeto, busca-se verificar a importância dessa mesma mutação, agora, no heterodímero SEPT7-SEPT3 através de estudos de termoestabilidade.

Palavras-chave: Termoestabilidade. Septinas. Heterodímero SEPT7-SEPT3.

Referências:

1 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology,** v. 13, n. 3, p. 183-194, 2012.

2 SIRAJUDDIN, M. et al. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature,** v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

3 MACEDO, J. N. A. et al. The structure and properties of septin 3: a possible missing link in septin filament formation, **Biochemical Journal**, v. 450, p. 95-105, 2013. doi: 10.1042/BJ20120851.

PG26

Caracterização e renormalização de grafos dirigidos através da utilização de análogos quânticos

MESSIAS, B. [1]; COSTA, L. F. [1]

messias@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Diversos fenômenos sociais e biológicos podem ser modelados por dinâmicas em grafos dirigidos, tais como a propagação de notícias em uma rede social, genética de multipopulações, processos difusivos, etc. Enquanto a simulação de tais fenômenos é feita rotineiramente por grupos de pesquisa e empresas o conhecimento atual no que tange as relações entre dinâmica e topologia em grafos dirigidos encontra-se em fase de desenvolvimento. Alguns trabalhos recentes demonstraram que modificar poucas arestas em um grafo dirigido podem mudar drasticamente dinâmicas sobre tais grafos, sejam elas descritas por processos difusivos ou de sincronização. Portanto, desenvolver ferramentas e metodologias(1) que possam aprimorar a compreensão de dinâmicas sobre grafos dirigidos é de particular importância tanto para fins práticos quanto acadêmicos. No presente trabalho utilizamos a abordagem de Hamiltonianos magnéticos(2) para desenvolver uma metodologia que possa vincular o estudo de dinâmica, estrutura e espectro em um grafo dirigido. Essa abordagem nos permitiu definir novas medidas para caracterização de tais grafos, tais como o calor específico. Utilizando uma rede neural artificial mostramos que a medida de calor específico fornece importantes informações sobre a estrutura de um grafo (apresentando taxas de acerto próximas de 100%), mesmo quando o "ensemble"de grafos para classificação possui indivíduos muito dissipares entre-si. Tendo encontrado uma medida efetiva de caracterização de grafos dirigidos, mostramos de forma analítica como os valores dessa medida se relacionam com a estrutura do grafo para alguns casos simples evidenciando padrões de simetria. Também mostramos que assim como na mecânica estatística um processo de renormalização pode ser definido para o grafo dirigido tal que o comportamento do calor específico seja preservado durante as etapas de tal processo. Esse processo de renormalização é definido em um espaço métrico oculto associado ao grafo dirigido, o qual pode ser obtido tanto a partir do Hamiltoniano magnético original quando da solução da dinâmica de uma partícula quântica(3) se propagando no grafo. Mostramos que, para alguns casos, os dois são equivalentes.

Palavras-chave: Grafos. Aharonov–Bohm. Difusão. Mecânica estatística. SOM.

Referências:

1 HARTt, J. D.et al. Adding connections can hinder network synchronization of time-delayed oscillators. **Physical Review E**, v.*92*, n.2, p.022804,2015.

1 FANUEL, M.; ALAÍZ, C. M.; SUYKENS, J. A. K. Magnetic eigenmaps for community detection in directed networks. **Physical Review E**, v. 95, n. 2, p. 022302-1-022302-13, 2017.

2 AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. **Physical Review**, v. 115, n. 3, p. 485-491, 1959.

PG27

Measurement of the deuterium to hydrogen flux ratio with the AMS-02 detector

BUENO, E. F. [1]

eduardo.ferronato.bueno@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Cosmic rays (CRs) are charged and highly energetic particles that reach the Earth from space. Production mechanisms, acceleration and propagation of these particles are not completely clear and precise measurements of the flux and composition of cosmic rays may help to understand these phenomena. In the conventional model, GeV to TeV energy cosmic rays sources are Supernova Remnants (SNR). The so called "primaries", such as ^{1}H, ^{4}He, e^{-}, and C are believed to be produced and accelerated at the sources, while "secondaries",such as e^{+}, ^{2}H, ^{3}He, Li, and Be originate from the collisions of primary cosmic rays in the interstellar medium. Hence, secondaries cosmic rays carry information on the propagation of CRs in the Galaxy, and, the measurement of their flux is used to constrain parameters on CRs propagation models. Studying secondary-to-primary ratios is useful as it factors out the unknown source spectrum of the progenitor.(1) One of such commonly studied ratios is the B/C ratio, but others ratios, like ^{2}H/^{1}H and ^{3}He/^{4}He probe a different Z/A regime, therefore testing the "universality" of propagation mechanisms. A precision measurement of the deuterium to hydrogen flux with the AMS-02 detector, a high precision particle physics experiment operating aboard the International Space Station since May 2011, will be presented.

Palavras-chave: Cosmic rays. Astroparticle. Propagation. AMS-02.

Referências:

1 COSTE, B. et al. Constraining galactic cosmic-rays parameters with Z <= 2 nuclei. **Astronomy & Astrophysics**, v.539, p. A88, 2012.doi:10.10510004-6361/201117927.

PG28

Caracterização de jamming avoidance response em peixes gymotiformes e modelo de deflexão de seu campo elétrico em coespecíficos

CESARINO, V. B. [1]; PINTO, R. D. [1]

vinicius.cesarino@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A descarga do órgão elétrico (DOA) do *Gymnotus carapo* (peixe pulsador) assume duas importantes funções no repertório comportamental do espécime: eletrolocalização e eletrocomunicação coespecífica, onde esta última é representada por uma variedade de alterações no intervalo entre os pulsos elétricos do peixe (IPI)(1). Apesar do comportamento elétrico chamado de *Jamming Avoidance Response* (JAR) ser característico e bem documentado em espécies de peixes onduladores (2), um comportamento correspondente no gymnotiforme foi encontrado em resultados preliminares, sendo observados em peixes com IPI próximos. Nossas observações sugerem uma relação entre a quantidade de JAR observada com a distância entre dois peixes fixados paralelamente. Tal estudo foi dirigido posicionando dois peixes em diferentes orientações e distâncias. Utilizando desta relação entre JAR e a distância entre dois peixes fixados foi possível inferir a distância necessária para que um peixe mude seu comportamento elétrico na presença de um coespecífico, bem como mapear o seu campo elétrico e criar um modelo de deflexão deste no corpo do outro peixe. Para tanto, três amplificadores de Instrumentação de entrada do tipo FET de alta velocidade (INA111) foram feitos sob medida para criar uma sonda tridimensional de tamanho reduzido capaz de captar e amplificar o sinal elétrico do peixe desprezando ruído de modo comum.

Palavras-chave: Jamming Avoidance response. Gymnotus. Electrocommunication. Pulse type electric fish.

Referências:

1 FORLIM, C. G.; PINTO, R.D. Automatic realistic real time stimulation/recording in weakly electric fish: long time behavior characterization in freely wimming fish and stimuli discrimination. **PLoS ONE**, v.9, n.1, p. 1–14,2014.

2 BULLOCK, T.H.; HAMSTRA, R.H.; SCHEICH, H. The Jamming avoidance response of high frequency electric fish. **Journal of Comparative Physiology**, v.77, n.1, p.1-22, 1972.

PG29

Topological phase signature in Shubnikov-de Haas oscillations of 2D bulk systems

COSTA, J. V. I. [1]
joao.ignacio.costa@usp.br
CANDIDO, D. R. [1]
EGUES, J. C. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The longitudinal resistivity of a 2D bulk system subjected to a perpendicular magnetic field quite generally exhibits magneto-oscillations. This is a magnetoresistance phenomenon known as Shubnikov-de Haas (SdH) oscillations. In a semiclassical picture, the effect relies mainly on the frequency of electrons moving around the Fermi circle. Beatings in those oscillations are then understood to be due to the difference in particle densities in different bands at the same Fermi level (1) and thus also useful to understand band structure. More recently, the rising interest in 2D bulk topological insulators led to the study of SdH oscillations in quantum wells (QW). (2) This particular experimental setup with an In/As QW obtained magneto-oscillations highly dependent of well parameters that are well modeled within the Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) model.(3) Differently from the semiclassical approach, here we use a formalism based on the Poisson summation formula (PSF) to include quantum effects the BHZ model coupled to a magnetic field. We calculate the magnetoresistivity using a Drude-like formulation and insert the quantum behavior via the system's DOS, which is computed analytically via trace formulas based on PSF. The obtained magnetoresistance displays SdH oscillations that vary in frequency and amplitude when the BHZ parameters are changed. In some cases beatings are also present. Unusual beatings are found when modeling systems with Mexican hat dispersion. Further analytical analysis shows that these novel beatings are not due difference in density at different bands, as classically argued, but due difference of density between holes and electron states in the same band. Considering that the Mexican hat dispersion is only found in non-trivial topological systems, a new possibility for probing topological insulators in its bulk form is found. It's interference between hole and electron states can also be interpreted semiclassically. Mainly, the appearance of two Fermi surfaces with opposite group velocities opens new possibilities for the study of magnetic phenomena in systems with SOI. This work was supported by FAPESP, CNPq and CAPES research funds.

Palavras-chave: Magnetoresistance. Magneto-oscillations. Topological insulator. Spin-orbit. Spintronics.

Referências:

1 ENGELS, G. et al. Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped $In_xGa_{1-x}As/InP$ quantum wells for B→0. **Physical Review B**, v. 55, n. 4, p. R1958, 1997.

2 BEUKMAN, A. J. A. et al. Spin-orbit interaction in a dual gated InAs/GaSb quantum well. **Physical Review B**, v. 96, n. 24, p. 241401, 2017.

3 BERNEVIG, B. A.; TAYLOR L. H.; ZHANG, S. C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. **Science**, v. 314, n. 5806, p. 1757, 2006.

PG30

Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas humanas

LEONARdo, D. A. [1]; NASCIMENTO, A. F. [2]; ANDRÉ, I. [3]; VALAdaRES, N. F. [4]; WATANABE, T. F. [1]; USON, I. [5]; GARRAT, R. C. [1]

dleonardo@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Laboratório Nacional Luz Síncontron - CNPEM

[3] Center for Molecular Protein Science - Lund University

[4] Departamento de Biologia Celular - UNB

[5] Institut de Biologia Molecular de Barcelona - IBMB

Septinas são proteínas envolvidas em diversos processos celulares cuja expressão deficiente (tal como um enovelamento incorreto) culmina em diferentes doenças. Para realizar suas funções, septinas formam filamentos utilizando dois tipos de interfaces: a interface G, que se dá por meio do domínio de ligação ao GTP/GDP (ou domínio G), e a interface NC, que é formada pelos domínios N e C-terminais. (1) As 13 septinas humanas formam 4 grupos, das quais as mais bem estudadas como heterofilamento são, respectivamente, SEPT2-SEPT6-SEPT7. Estas proteínas apresentam uma ordem específica de interação, sendo que elas podem ser substituídas por outras no filamento sem que haja perda de integridade do mesmo, desde que a substituição se dê por outra do mesmo grupo. (2) Embora se conheça o tipo de interface de contato e a ordem especifica na montagem do filamento, ainda são desconhecidos os mecanismos moleculares que controlam a correta polimerização deste. Aqui descrevemos os estudos realizados nas interfaces G e NC de septinas com o intuito de constatar a substituição de septinas por outras do mesmo grupo e desvendar os determinantes estruturais da especificidade de interação. Foram co-expressas e co-purificadas as combinações SEPT2-SEPT11, SEPT2-SEPT8, SEPT4-SEPT6, SEPT4-SEPT8 e SEPT4-SEPT11 para estudos da interface G; as regiões *coiled-coils* do domínio C-terminal das septinas SEPT1, SEPT2, SEPT4 e SEPT5 foram sintetizadas para estudos da interface NC. As combinações "G" foram caracterizadas usando técnicas biofísicas, mostrando dímeros homogêneos em solução (SEC, SEC-MALS e SAXS) com a presença de GTP (SEPT6, SEPT8 e SEPT11 – septinas catalíticamente inativas) e GDP (SEPT2 e SEPT4 – septinas catalíticamente ativas) em proporções equimolares. Além disso, apresentam um espectro de CD característico de proteínas β (como esperado para GT-Pases) mas com estabilidade térmica diferente para cada dímero, sendo o mais termicamente estável SEPT2-SEPT11 (com uma temperatura de melting de 68 °C), o que poderia indicar uma preferência de interação para a formação do complexo. Por fim, cristais dos dímeros SEPT2-SEPT11, SEPT2-SEPT8 e SEPT4-SEPT11 foram obtidos e serão coletados no sincrotron *Diamond facility* (Inglaterra). Estes resultados podem mostrar interações importantes para a especificidade do complexo por meio da interface G. Por outro lado, as estruturas cristalográficas dos *coiled-coil* foram resolvidas como um tipo de estrutura inédita. O *coiled-coil* da SEPT1 e SEPT4 mostra uma orientação antiparalela, com um lado hidrofílico e outro hidrofóbico (motivo ainda não reportado nas bases de dados de proteínas) enquanto que o *coiled-coil* da SEPT5 tem uma orientação paralela (com interface de contato clássica, totalmente hidrofóbica). Analisando as sequencias de todos os *coiled-coils* observamos que se adotarmos como base a fase do *coiled-coil* antiparalelo todos teriam a capacidade de ter essa orientação, e se adotamos a fase

do paralelo todos teriam a orientação paralela. Isto sugere que estas sequências tem a capacidade de adotar as duas orientações, o que poderia explicar a formação de estruturas de alta complexidade, como redes a partir de filamento de septinas.

Palavras-chave: Septin. GTPase. Biophysics. Crystallography.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. et al. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

2 KINOSHITA M. et al. Self- and actin-templated assembly of mammalian septins. **Developmental Cell**, v. 3, n. 6, p. 791-802, 2002.

PG31

Interação e internalização de fotossensibilizadores em parede celular microbiana

CAFACE, R. A. [1]; GUIMARÃES, F. E. G. [1]

raphael@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Fisica de São Carlos - USP

A terapia fotodinâmica é uma técnica utilizada na descontaminação microbiana e tratamento de infecções. Esta terapia consiste na união de uma gente fotossensibilizante, luz no comprimento adequado e oxigênio para desencadear a geração de agentes citotóxicos. Neste trabalho foi caracterizada a interação e a ação da molécula Photodithazine© (PDZ) (1) e três curcuminas provindas de diferentes origens (natural, sigma e sintética) em *Candida albicans*. A PDZ interage fracamente no escuro com a parede celular e apresenta internalização não detectável durante incubação em *Candida albicans*. O mesmo não acontece com a curcumina que tem alta internalização na célula microbiana. A interação e a ação dos fotossensibilizadores (FSs) em *Candida albicans* foram estudadas temporalmente através da microscopia de fluorescência confocal com excitação por 1 (1P) e 2 fótons (2P) nos modos canal e espectral e imagens de tempo de vida. Este trabalho demonstra que uma alta internalização pode ser induzida pela luz de excitação para ambos FSs. Esta internalização induzida pode ser realizada em baixas doses de radiação luminosa por 1P e 2P e favorece uma internalização homogênea dos FSs em grandes áreas. Estes resultados sugerem a proposição de novos protocolos de PDT que insere uma pré iluminação em baixa dose durante o processo de incubação. Apenas a incorporação induzida na pré-iluminação levou à morte das células na área iluminada por apoptose através de iluminação 1P e por necrose por 2P. Para iluminação em PDZ com laser em 800 nm, a dose de irradiação média necessária para induzir a internalização foi de 80 $J.cm^{-2}$, enquanto para o laser contínuo de 405 nm, a dose média foi de 9 $J.cm^{-2}$. Para a curcumina natural foi visto que mesmo com doses altas de luz (photobleaching) ainda acontecia a internalização do FS, indicando que essa molécula está livre no interior das células e que podem ser trocadas em um tempo de 2 minutos com moléculas não fotodegradadas no exterior das células que se comportam como um reservatório de curcumina para células irradiadas com luz. Assim, os resultados indicam que realizar uma pré-iluminação durante o período de incubação induz a internalização em alta concentração através da produção de pequenos danos na parede celular.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. Candida albicans. Fotossensibilizador.

Referências:

1 SILVA, L F. F. et al. Repeated applications of photodynamic therapy on Candida glabrata biofilms formed in acrylic resin polymerized. **Lasers in Medical Science**, v. 32,n.3, p. 549–555, 2017.

PG32

Luminescence properties and Up-conversion emission of Er3+ /Yb3+ /Tm3+ Doped Zinc-Tellurite Glasses

LOZANO, G. [1]

glozano@usp.br

SILVA, O. B. [1]

SU-LI, M. [1]

RIVERA, V. A. G. [2]

MAREGA JUNIOR, E. [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USPI

[2] Facultad de Ciencias Físicas - Universidad Nacional Mayor de San Marcos

In recent years, rare-earth ions (REI) doped glasses have been widely studied for their luminescent properties, such as the near-infrared to visible light emission via up-conversion (UC). Particularly, glass oxides (e.g., TeO2, SiO2 and B2O3) are optically transparent for UV to NIR spectral range and their capability to incorporate high concentra tions of REI (1) and obtain coloured light emission, however, high efficiency has not been achieved. The samples were prepared by melt quenching method, where the nominal concentration was (67−x−y)TeO −30ZnO−3Yb2O2−xTmO3 −yEr2O3 in mol% (x = 0.00, and 0.10, y = 0.00 and 0.03). The studied samples were polished for optical measurements and labelled as TZYb-10∗x-10∗y (TZYb-00-00,TZYb-00-03,TZYb-10-00 and TZYb-10-03). Tuneable up-conversion emission was obtained by adjusting the laser excitation power at 972 nm. The absorption spectra from 450 to 700 nm shows that the transition in the Yb3+ ions at 980 nm is predominant in all samples, because of the large absorption cross section for Yb3+ between 972 and 982 nm. Additionally, there is energy transfer process between Tm3+ and Er3+ in the sample TZYb-10-03 as reported in (2), where the Er3+ acts as acceptor and Tm3+ as a donor in this glass matrix. In the UC spectra, the characteristic bands emission of Er3+ and Tm3+ are evidenced (482, 485, 630, 551 and 657 nm). These bands correspond to the RGB light. The results show that TeO2 -ZnO glasses doped with Er3+ /Yb3+ /Tm3+ are capable to produce coloured light by a mixture of red, green and blue light emission via up-conversion with a controlled laser power excitation at 972 nm. The addition of Yb3+ ions improve the efficiency of the up-conversion process, because acts as a donor via energy transfer to Er3+ and Tm3+ ions. These materials are propitious candidates for applications in the development of photonic devices and solid-state lighting.

Palavras-chave: Up-conversion. Tellurite Glasses. Luminescence Properties. Rare-earths.

Referências:

1 PISARSKI, W. A. et al. Erbium-doped lead silicate glass for near-infrared emission and temperature-dependent up-conversion applications. **Opto-Electronics Review**, v. 25, n. 3, p. 238-241, 2017.

2 RIVERA, V. A. G. et al. White light generation via up-conversion and blue tone in Er 3+ /Tm 3+ /Yb 3+ -doped zinc-tellurite glasses. **Optical Materials**, v. 67, p. 25–31, 2017. doi.org/10.1016/j.optmat.2017.03.028.

PG33

Investigation of PDT effects in 3D culture of breast cancer using the magnetic levitation method

CAMPOS, C.P.[1]; IEMARK, I.[1]; INAda, N.M.[1]; KURACHI C.[1]

carolinapancampos@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Photodynamic therapy (PDT) is a noninvasive technique, which consists in the combination of light, a photosensitizer (PS) and molecular oxygen, and it has been used in clinical studies as treatment for metastatic breast tumor.(1) In vitro studies are essential to guide the treatments and to understand the PDT effects in remaining tumors, in particular development of cell resistance and selection of aggressiveness.(2) Tridimensional (3D) cell cultures models can provide more similarities with the tumor natural microenvironment such as cell-cell and cell-extracellular matrix interaction, therefore they enable a better *in vitro* investigation.(3) The purpose of this study is to investigate a 3D model based on magnetic levitation as a model to perform PDT and assess remaining tumors in vitro. A standardization of spheroid growth was made for a breast adenocarcinoma cell line (MCF-7). Distribution of the PS inside the spheroid was investigated by concofal microscopy and the cryo-sections by fluorescence microscopy. A protocol of low-dose PDT was established in order to enable remaining tumors to exist. Three PDT sessions were performed 48 h apart with a chlorine e6 (Photodithazine©, LLC "VETA-GRAND", Russia) at the concentration of 50 μ g/mL and LED irradiation at 660 nm. Macroscopic damages of different intensities were observed in the spheroids after each session. Twenty-four hours after the last PDT session, the spheroid was completely disrupted. Using the magnetic drives between the PDT sessions prolonged the integrity of the tumor, enabling the investigation on remaining cells. Alterations in proteins and other molecules in the cell-cell interface and in the cell membrane are being investigated with Confocal Raman Microscopy. The combination of these results can provide information about death mechanisms of PDT in 3D tumors. The follow up of spheroids for some days after the PDT sessions can be used to investigate the effects of this therapy in remaining tumors.

Palavras-chave: Photodynamic therapy. 3D culture. Magnetic levitation method. Breast cancer.

Referências:

1 SHISHKOVA, N.et al. Photodynamic therapy for gynecological diseases and breast cancer. **Cancer Biology & Medicine**, v. 9, n. 1, p. 9–17, 2012.

2 FARIA, C.M.G. de et al. A threshold dose distribution approach for the study of PDT resistance development: a threshold distribution approach for the study of PDT resistance. **Journal of Photochemistry and Photobiology B:** biology, v. 182, p. 85–91, 2018.doi: 10.1016/j.jphotobiol.2018.03.022.

3 LEE, G.Y. et al. Three-dimensional culture models of normal and malignant breast epithelial cells. **Nature Methods**, v. 4, n. 4, p. 359–365, 2010.

PG34
Test particles and field in binary black hole space-times

CAPOBIANCO, R. A. [1]
rogerio.capobianco@gmail.com
HARTMANN, B. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In Newtonian gravitational theory, a system of point charged particles can remain in static equilibrium under their mutual gravitational and electromagnetic forces, provided that for each particle the charge, e, is related to the mass, m, by e = m. In General Relativity this problem is described by a multi centered source free black hole (BH) exact solution of Einstein-Maxwell field equation, known as Majumdar-Papapetrou (MP) geometries, where every point particle corresponds to an extreme Reisner-Nördstrom BH.(1) In this research we are interested in studying the geodesic motion of a structureless particle and field in a binary BH space-time for MP and generalized MP geometries. The first case studied is the geodesic motion in MP space-time, following the metodology propose by Asumpção et al. (2), in which the geodesic equations are presented and two constants of motions are found. For generalized MP solutions two diferent cases are being studied, firstly a cosmological time dependent solution for a MP like system (3), when a positive cosmological constant λ is considered in Einstein-Maxwell field equation, and secondly the geodesic motion of fields in a dilation BH space-time (4) in four dimensions, when the electrostatic field is coupled with a real scalar field (dilation field).

Palavras-chave: Black holes. Einstein-Maxwell equation. Dilation field. Cosmologic solutions.

Referências:

1 HARTLE, J. B.; HAWKING, S. W. Solution of Einstein-Maxwell equations with many black holes. **Communications in Mathematical Physics**, v. 26, n. 2, p. 87-101, 1972.

2 ASSUMPÇÃO, T. et al. **Black hole binaries**: ergoregions, photon surface, wave scattering and quasinormal modes. Available from: </hrefhttps://arxiv.org/pdf/1806.07909.pdfhttps://arxiv.org/pdf/1806.07909.pdf>. Accessible at: 23 Jan. 2018.

3 KASTOR, D., TRASCHEN, J. **Cosmological multi-Black hole solution**. Available from: <https://arxiv.org/pdf/hep-th/9212035.pdf>. Accessible at: 01 July. 2018.

4 SHIRAISHI, K. Multicentered solution for maximally charged dilation black hole in arbitrary dimensions.Available from: <https://arxiv.org/pdf/1402.5484.pdf>. Accessible at: 23 Jan. 2017.

PG35

A model system based on synthetic rocks for morphological fluid dynamics studies in porous media

CARdoSO, C. [1]; OLIVEIRA, E. L. [1]; FOERSTER, B. U. [1]; FORTULAN, C. A. [2]; BONAGAMBA, T. J. [1]; PAIVA, F. F. [1]

camilabaleiro@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[3]Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Classical Magnetic Resonance (MR) applications for materials science and medical diagnosis are being increasingly applied to study porous media, mainly due to the interest of the oil industry. However, MR imaging (MRI) in porous media has its specific challenges due to short relaxation times and different magnetic susceptibilities between the rock walls and pores, which can compromise MR image quality. (1-2) In the present work, we introduce a model system, developed to mimic real rocks, to study morphology in porous media under precisely controlled conditions. The proposed rock model was used to compare different imaging techniques and acquisition protocols, which allowed us to evaluate the applicability of conventional MRI techniques for porous media investigation.Synthetic rocks, produced for morphological and fluid dynamics studies, consist of alumina powder agglomerated with polyvinyl-butyral (PVB)/ Isopropolic alcool as binder, and the agglomerates were isostatically pressed and sintered. By adding small amounts of graphite particles into alumina agglomerates, we induced pores with well-specified sizes; the graphite was burn out during the sintering process, giving place to void spaces. Also, by inserting PVB/graphite filaments, we could induce connected pathways similar to the "wormholes" produced by acidification processes (3) as used in the petroleum industry. The resulting samples were investigated with Magnetic Resonance (MR) imaging techniques, which were benchmarked against high-resolution microCT images.With our synthetic rock samples, we were able to evaluate the applicability of classical MRI methods by comparing morphology measures obtained from the MR images and microCT and comparing flow images with simulations obtained with PerGeos software. Post processing included assisted registration of MR and CT images, in order to to permit comparative evaluation of pore sizes and wormholes at identical locations.Precise pore sizes were determined from microCT images and used to compare with values measured by MR imaging. The maximum difference in pore size determined by the two methods was 200μm and 300μm for the samples with smaller and larger pores respectively. These deviations are close to the resolution of the MR images, possibly due to partial volume effects in the MRI. The results show that within the resolution limits of MR imaging, the method can quantitatively determine pore sizes. To improve the minimum distinguishable pore size, MR resolution can still be enhanced at, however, the cost of increased scan time.Our data shows that the proposed sample preparation method can generate synthetic rocks, which mimics real and acid-treated rocks. This can play an important role for porous media studies in controlled systems as well as for MRI validation studies, where short relaxation times and magnetic susceptibility changes between rock walls and the fluids occupying the pores might impair the proper evaluation of the media. Using our synthetic samples, we showed that conventional MRI could provide useful morphological information despite the aforementioned inherent difficulties. Notwithstanding the conservative approach in MRI, our synthetic rocks will help to establish MRI protocols to investigate problems where fluid dynamics is relevant, a subject that still represents a challenge in noninvasive porous media studies.

Palavras-chave: Porous media. Magnetic resonance imagin. MRI. Petrophysics.

Referências:

1 GALLEGOS, D.P. et al. A NMR technique for the analysis of pore structure — application to materials with well-defined pore structure. **Journal Colloid and Interface Science,** v. 119,n.1,p. 127–140,1987.

2 HAACKE, E. et al. **Magnetic resonance imaging:** physical principles and sequence design. New York : Wiley-Liss, 1999.

3 DACCORD,G. Chemical dissolution of a porous medium by a reactive fluid. **Physical Review Letters, v.** 58, n.5, p.479-482, 1987.

PG36

Simetria local versus global: uma abordagem via teoria de recursos.

CARMO, R. S. [1]; SOARES-PINTO, D. O. [1]

rafael.carmo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

No mecanismo de Page-Wootters considera-se o tempo como um parâmetro inacessível, sendo que sua aparente passagem seria um fator emergente de correlações entre subsistemas de um estado global. Recentemente, Mendes e Oliveira-Pinto (1) propuseram que uma condição necessária (mas não suficiente) para tal mecanismo funcionar são as coerências internas entre o sistema de interesse e o chamado sistema relógio. Numa perspectiva mais ampla, Martinelli e Soares-Pinto (2) abordaram o mecanismo utilizando uma teoria de recursos quânticos de assimetria que busca analisar quais são as condições físicas necessárias para um sistema quântico ser considerado um bom referencial e poder ser utilizado então como recurso, dada a ausência de um referencial clássico. Definindo o conceito de assimetria mútua e identificando-o com coerência interna, tendo como foco o grupo de translações temporais, Martinelli e Soares-Pinto (2) abriram espaço para investigar não somente o mecanismo de Page-Wootters como também a relação entre coerência interna e correlações a partir de uma abordagem de teoria de recursos. Neste trabalho, o foco será estender essa investigação utilizando os conceitos de assimetria global e local, procurando compreender a sua diferença na aplicação de diferentes protocolos de comunicação onde limitações físicas e operacionais, como a ausência de referenciais externos, podem ser contornadas através da utilização de um estado recurso.

Palavras-chave: Teoria de recursos quânticos. Assimetria local e global. Referenciais quânticos.

Referências:

1 MENDES, L. R. S.; SOARES-PINTO, D. O. **Time as a consequence of internal coherence**. 25 jun. 2018. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1806.09669>. Acesso em: 10 set. 2018.

2 MARTINELLI, T.; SOARES-PINTO, D. O. **Quantifying quantum reference frames in composed systems**: local, global and mutual asymmetries. 13 ago. 2018. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1808.04209>. Acesso em: 10 set. 2018.

PG37

Traditional conjugated polymer as efficient mixed conductors for high-performing electrochemical transistors

CAVASSIN, P. [1]

priscila.cavassin@gmail.com
FARIA, G. C. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Organic electrochemical transistors have garnered attention for applications in biological interfacing, logic circuits and neuromorphic devices. (1) Despite recent advances in device fabrication and materials development, however, only a narrow class of polymers have been found to stably operate in these new applications. To this end, we have developed general guidelines that allow for the fabrication of OECTs with semiconducting polymers that do not uptake water efficiently. The methodology produces devices that operate stably at room temperature, exhibits excellent transistor characteristics, (e.g., transconductance and volumetric capacitance), and is versatile, making it possible to fabricate OECTs with virtually every conjugated polymer synthesized to date. Using the general guideline here proposed, we have successfully fabricated high-performing OECTs using standard conjugated-polymers, such as, poly(3-hexylthiophene) (P3HT). Additionally, by perfoming electrochemical measurements on the devices, we are able to extract key fundamental properties of both the device and the active channel materials, including the volumetric capacitance (CV), the intrinsic hole/electron mobility (μ), as well as the product μ*CV, which has been used as the benchmark for comparing OECT devices. (2) We have used such benchmark to compare our OECTs performance with previously reported materials and show that some of our devices are the best published to date.

Palavras-chave: Organic electrochemical transistor. Mixed conductors.

Referências:

1 RIVNAY, J. et al. Organic electrochemical transistors. **Nature Reviews Materials**, v. 3, 2018. doi: 10.1038/natrevmats.2017.86.

2 INAL, S.; MALLIARAS, G. G.; RIVNAY, J. Benchmarking organic mixed conductors for transistors. **Nature Communications**, v. 8, n. 1, 2017. doi: 10.1038/s41467-017-01812-w.

PG38

Peptídeo β -amiloide da doença de Alzheimer estudado por ressonância magnética nuclear de alta pressão

CAVINI, I. A. [1];MUNTE, C. E. [1,2]; WILLBOLD, D. [3];KALBITZER, H. R. [2];[1]

italo.cavini@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Universität Regensburg - Alemanha

[3]Universität Düsseldorf - Alemanha

A principal característica histológica da doença de Alzheimer é a presença de placas amiloides no cérebro de pacientes.(1) O constituinte mais abundante dessas placas é o peptídeo β -amiloide (Aβ). Inicialmente solúvel, o peptídeo exibe em solução um intrincado equilíbrio entre estados monoméricos, oligoméricos (alguns deles tidos como as espécies tóxicas) e fibrilares, o que impossibilita sua cristalização e posterior determinação de sua estrutura por difração de raios-X. A técnica de espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) de alta pressão, por sua vez, permite a estabilização e detecção de estados conformacionais raros de mais alta energia, quase não populados à pressão ambiente. Utilizando a RMN de alta pressão, um trabalho do nosso grupo detectou a presença de diferentes confôrmeros monoméricos de Aβ (1-40) em solução, um estado mais enovelado e estados parcialmente desenovelados, coexistindo em equilíbrio com oligômeros e fibrilas.(2) O trabalho visa à caracterização termodinâmica e estrutural dos estados excitados raros do peptídeo Aβ através da técnica de RMN de alta pressão. O aluno adquiriu e analisou uma grande coleção de espectros de RMN (^{1}H-^{15}N-HSQC, ^{1}H-^{13}C-HSQC e 2D-HNCO) variando a pressão (3 a 200 MPa, 20 MPa de intervalo) e temperatura (277 e 288 K) do peptídeo beta-amiloide Aβ (1-40). A concentração peptídica empregada nesses experimentos foi sempre abaixo de 80 μM a fim de evitar a formação de agregados/oligômeros. Predições de estrutura secundária realizadas pelo programa TALOS+ revelaram que o peptídeo Aβ adota estruturas estendidas do tipo fitas-β , similar com aquelas encontradas em estruturas de fibras amiloides. A partir das curvas de deslocamento químico e volume de pico plotados contra a pressão, ao menos quatro estados monoméricos puderam ser detectados, três deles em troca rápida. Esses três estados monoméricos foram caracterizados termodinamicamente através da obtenção dos valores da variação da energia livre de Gibbs (δG_{ij}) e de seus volumes parciais molares (δV_{ij}). Coeficientes de pressão corrigidos (linear, B_1*e quadrático, B_2*) foram obtidos para todos os átomos analisados assim como a razão B_2*/B_1* combinada de cada resíduo, que sabe-se estar relacionada com a razão de quantidades termodinâmicas relevantes. A análise preliminar de contatos NOEs e de acoplamentos ^{3}JHα -HN reforçam a existência de estruturas estendidas com propensão a fitas-β , tanto a pressão ambiente (0,1 MPa) quanto em alta pressão (275 MPa). Também em colaboração com o grupo de pesquisa da Universität Regensburg, em conjunto com o grupo do Prof. Dr. Dieter Willbold (Universität Düsseldorf, Alemanha), caracterizou-se a interação entre o peptídeo Aβ e os D-peptídeos RD2 e RD2D3 gerados a partir do peptídeo D3, um inibidor D-enatiomérico de fibras e promissor candidato a fármaco. Nossos resultados indicam que RD2 e RD2D3 reconhecem uma conformação de Aβ mais compacta, que é pouco populada à pressão ambiente.(3) A formação dos heterodímeros Aβ -D-peptídeos, com constante de dissociação entre 0,5 e 8 μM, leva, em última instância, à agregação dos oligômeros tóxicos.(3) Espera-se que, em breve, esses peptídeos possam ser testados em humanos como uma terapia efetiva contra a doença de Alzheimer.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Doença de Alzheimer. Peptídeo beta-amiloide.

Referências:

1 BLENNOW, K.; DE LEON, M. J.; ZETTERBERG, H. Alzheimer's disease. **Lancet**, v. 368, n. 9533, p. 387–403, 2006.

2 MUNTE, C. E. et al. Distinct conformational states of the Alzheimer beta-amyloid peptide can be detected by high-pressure NMR spectroscopy. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 52, n. 34, p. 8943–8947, 2013.

3 CAVINI, I. A. et al. Inhibition of amyloid Aβ aggregation by high pressures or specific D-enantiomeric peptides. **Chemical Communications**, v. 54, n. 26, p. 3294–3297, 2018.

PG39

Desenvolvimento de nanocubos de SrTiO3 aplicados na fotossíntese artificial para produção de hidrogênio combustível

CENTURION, H. A. [1]; GONÇALVES, R. V. [1]

higorcenturion@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os problemas associados ao uso de combustíveis fósseis, como mudanças climáticas, dependência econômica e esgotamento de reservas, têm alavancado diversos estudos no campo do desenvolvimento de fontes de energias renováveis. Dentre as principais matrizes energéticas que podem cumprir este importante papel, podemos destacar o hidrogênio combustível, gerado a partir da quebra da molécula de água , por um mecanismo conhecido como fotossíntese artificial. (1) No tocante aos materiais utilizados para esta finalidade, podemos destacar o titanato de estrôncio ($SrTiO_3$), devido a sua excelente estabilidade química, posições adequadas das bandas de energia para a reação completa da quebra da molécula da água em H_2 e O_2 de forma estequiométrica. No entanto, este material possui elevado energia de *band-gap,* restringindo sua atividade fotocatalítica à região ultravioleta do espectro solar. (1-2) No presente trabalho, buscou-se sintetizar o $SrTiO_3$ via síntese de sal fundido (*molten salt synthesis*) utilizando como os sais da reação KCl e NaCl em quantidades equimolares. Nesta síntese, os reagentes foram misturados em um almofariz de ágata por 1 hora e 30 minutos e levados a um forno do tipo mufla com uma taxa de aquecimento de 3°C/min até a temperatura de 900 °C por 6 horas e, deixado resfriar naturalmente a temperatura ambiente. Após a etapa de calcinação, o material foi lavado diversas vezes com água deionizada a fim de retirar os sais da mistura. A estrutura cristalina do material foi investigada por meio da difração de Raios X (DRX), os modos vibracionais foram obtidos por meio da espectroscopia Raman, o aspecto topográfico superficial foi estudado pela Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), suas propriedades eletrônicas de superfície foram exploradas com o auxílio da Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X (XPS) e por fim, a área superficial foi obtida por meio da técnica Barret-Emmett-Teller (BET). Os resultados sugerem a presença de uma única fase cristalina, livre de sais e reagentes residuais que podem interferir na atividade fotocatalítica do material, além do mais, obtivemos partículas com morfologia cúbica. As propriedades estudadas, são de suma importância para garantir um elevado rendimento na produção de H_2, além de permitir a formação de heterojunções e junções tandem, assim, melhorando o desempenho da atividade fotocatalítica. Esses materiais serão aplicados na reação da fotossíntese artificial em um futuro próximo.

Palavras-chave: Nanomateriais. Fotossíntese artificia. Hidrogênio.

Referências:

1 SOUZA, F. L.; LEITE, E. R. (Eds.) **Nanoenergy**: nanotechnology applied for energy production. 2nd ed. Cham: Springer International Publishing, 2018. 330 p.

2 ZHOU, X.; SHI, J.; LI, C. Effect of metal doping on electronic structure and visible light absorption of $SrTiO_3$ and $NaTaO_3$ (Metal = Mn, Fe, and Co). **Journal of Physical Chemistry C**, v. 115, n. 16, p. 8305-8311, 2011.

PG40
Aspectos da QCD na rede à temperatura finita

CERQUEIRA, M. C.[1]; MENdeS, T.[1]

matheus.c.cerqueira@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A cromodinâmica quântica (QCD) é a teoria de gauge que descreve as interações fortes através de um modelo de quarks, interagindo por troca de campos gluônicos. Uma característica desta teoria é que em limites de altas energias, a sua constante de acoplamento se torna desprezível, no qual esta se chama liberdade assintótica. A outra característica da QCD é que em baixas energias, há um aumento da interação, de forma que quarks e glúons estejam confinados dentro de hádrons. Uma forma de estudar o comportamento confinante da QCD, é a partir de métodos não perturbativos. Assim, o método que está sendo implementado neste doutorado é o da QCD na rede, que consiste em escrever a teoria de forma discretizada.Simulações numéricas com métodos de Monte Carlo foram feitas para o modelo ferromagnético de Ising 2D, para que haja uma melhor compreensão do método computacional. Em seguida, foi estudado o modelo da QCD na rede para SU(2), que é muito semelhante ao modelo de Ising 2D. (1-2) Alguns resultados relevantes que estão sendo encontrados é em relação a transição de desconfinamento de quarks a temperatura finita. Isto se dá através da análise do loop de Polyakov, que se comporta como um parâmetro de ordem para a teoria. Assim, para a media do loop de Polyakov sendo nula, é possível observar a fase confinante da QCD, e para valores não nulos, a fase desconfinante. Como o trabalho estará se concentrando de início ao regime de puro gauge, analisar o loop de Polyakov é um bom início para encontrar posteriormente parâmetros termodinâmicos referentes ao propagador gluônico, próximo à transição de desconfinamento da teoria.(3) Como o trabalho estará se concentrando de início ao regime de puro gauge, analisar o loop de Polyakov é um bom início para encontrar posteriormente parâmetros termodinâmicos referentes ao propagador gluônico, próximo à transição de desconfinamento da teoria.

Palavras-chave: Cromodinâmica quântica. Loop de Polyakov. Transição de desconfinamento.

Referências:

1 GATTRINGER, C; LANG, C. **Quantum chromodynamics on the lattice:** an introduction presentation. Berlin: Springer, 2009.

2 ROTHE, H. J. **Lattice Gauge theories**: an introduction. 3rd ed. Hackensack: World Scientific Publishing, 2005.

3 KANAYA, K. An introduction to finite temperature quantum chromodynamics on the lattice. **Progress Theoreoretical Physics Supplemment,** v.131,p.73-105, 1998./hrefhttps://arxiv.org/ct?url=http%3A%2F%2Fdx.doi.org%2F10%252E1143%2FPTPS%252E131%252E7
doi:10.1143/PTPS.131.73.

PG41

Transição de fase quântica de átomos ultrafrios imersos em condensado de Bose-Einstein com rede de vórtices.

CHAVIGURI, R. H. [1]

riuspsc@gmail.com

CARACANHAS, M. A. [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

No contexto atual dos átomos ultrafrios, um tópico de bastante relevância consiste em misturas de gases ultrafrios tais como superfluidos bosônicos, fermiônicos, introduzir impurezas fermiônicas o bosônicas nos superfluidos. Neste trabalho tratamos um sistema composto por um BEC com rede de vórtice (1-2), o qual se sobrepõe a outro gás bosônicos ultrafrio fracamente interagente, correspondente às impurezas desse novo sistema. Consideramos o regime da rede profunda, obtido com um limite de impureza pesada. Por outro lado, uma nova tendência no campo dos átomos ultrafrios tem sido introduzir dinâmica artificial na rede óptica estática, para melhor simular os cristais de estado sólido nos modelos de matéria condensada. Com o nosso sistema, no entanto, fornecemos uma solução alternativa para o problema, onde a dinâmica advém naturalmente com os modos de excitações normais da rede de vórtices. Desenvolvemos um modelo Bose-Hubbard efetivo para descrever o polaron, quase partícula resultante da interação da impureza com o ''background'' da rede. Partindo desse Hamiltoniano, nosso objetivo tem sido explorar as novas propriedades de transporte e de interação das impurezas confinadas na rede, incluindo a interação de longo alcance mediada pelos fônons, isto é, os modos de Tkachenko. O modelo da rede de vórtices também engloba os novos desafios que surgiram na área de átomos ultrafrios em rede óptica, cuja configuração tem sido intensivamente explorada na direção de fornecer novas fases quânticas para espécie aprisionada, que vai além das fases superfluida e isolante de Mott já observadas nos experimentos. (3) Nosso sistema de estudo é promissor nesse aspecto, já que o alto controle dos seus parâmetros independentes nos permite alcançar as condições necessárias para a observação dessas fases. Temos a possibilidade de obter transições de fase quânticas com o ajuste de comprimento de espalhamento atômico, associada à técnica de imagem por absorção seletiva para caracterizar o estado da amostra aprisionada.

Palavras-chave: Condensado de Bose - Einstein. Gases ultrafrios. Transição de fase quântica.

Referências:

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

2 FETTER, A. Rotating trapped Bose-Einstein condensates. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 2, p. 647, 2009.

3 GREINER, M. et al. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. **Nature,** v. 415, n. 6867, p. 39-44, 2002.

PG42
Quantum thermodynamics and non-thermal heat engines

CHERUBIM, C. F. [1]; de BRITO, F. B. [1]; deFFNER, S. [2]

cleverson.cherubim@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Department of Physics - University of Maryland Baltimore

Quantum (Stochastic) thermodynamics (QT) (1-2) is an emerging field of research that aims to investigate how the laws of thermodynamics alter, or be altered by, the underlying physics of small quantum (classical) systems. With advances at the necessary technology to control and measure those small physical systems this field has acquired even more importance, not only in the sense that it can be tested, which is a good feature for basic research, but that new applications could be implemented at these scales, so a better comprehension of the limitations imposed by quantum thermodynamics turns out to be of a crucial importance for these goals, which forces theoreticians to produce experimentally relevant versions of these new concepts. Another important aspect present at those systems is that part of them work in a regime where its constituents are described by non-thermal states, in particular in non-thermal steady states, which brings to light a different thermodynamic description.One of the related subtopics that physicists deal with in QT and can possibly involve non-thermal stationary states is the physics of heat engines at the quantum domain, and one of the main features that this new regime could possibly allow, is the use of quantum resources as a way to overcome classical limitations imposed on its performance, like to attain efficiencies higher than Carnot's. This has generated a wave of ecstasy on the scientific community although it might be too soon to claim that these new features are true, because there is a different perspective of those results, when dealing with non-thermal states, that tells us that this Carnot's efficiency overcome cannot be attained if we consider that part of the energy absorbed by the quantum working substance, known as housekeeping heat, is used maintain its non-thermal stationary state. Another approach (3) towards this issue is the distinction of the "heat" absorbed from the environment in two different types of energy, the variation in passive energy which is the part responsible for the changes in entropy, and variation in ergotropy, that is a work-like energy that can be later extracted by means of a suitable unitary transformation. And in this case again, the irreversibility criterion to obtain the upper bound efficiency is different, because the ergotropy does not cause any entropy change. So in order to clarify the underlying physics of those systems in a non-thermal regime, any experimentally well suited content is more than welcome.We devised a experimentally relevant thermodynamic cycle for a transmon qubit working substance (WS) interacting with a non-thermal environment composed by two subsystems, a externally excited cavity and a classical heat bath with temperature T. The WS undergoes a non-conventional cycle (different from Otto, Carnot, etc.) through a succession of non-thermal stationary states obtained by slowly varying its bare frequency and the amplitude of the on the cavity applied field. We calculate the the efficiency of this engine, obtaining saximum value up to 35%.

Palavras-chave: Quantum thermal engine. Quantum thermodynamics. Steady state thermodynamics.

Referências:

1 VINJANAMPATHY, S.; ANDERS, J. Quantum thermodynamics. **Contemporary Physics**, v. 57,n.4, p.545, 2016.

2 SEIFERT, U. Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems, and molecular machines. **Reports on Progress in Physics**, v. 75, p.126001, 2012./hrefhttps://arxiv.org/ct?url=http%3A%2F%2Fdx.doi.org%2F10%252E1088%2F0034-4885%2F75%2F12%2F126001&v=88931c12doi:10.1088/0034-4885/75/12/126001.

3 NIEDENZU, W. et al. Quantum engine efficiency bound beyond the second low of thermodynamics. **Nature Communications**, v. 9, p.165, 2018.doi:10.1038/s41467-017-019991-6.

PG43

Estudos estruturais de Glicosiltransferases envolvidas na síntese de biofilmes em Enterococcus faecalis

daNTAS, L. O. [1]; NASCIMENTO, A. [1]

livia.clementino@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos fatores que confere resistência bacteriana é a formação de biofilmes, diminuindo de 10 a 1.000 vezes a sensibilidade de bactérias a antibióticos em comparação com células planctônicas. Apesar de não se conhecer exatamente o mecanismo pela qual a resistência bacteriana é habilitada, a propriedade do ambiente do biofilme facilitar a transferência horizontal de genes entre as bactérias que compõem o biofilme e a própria barreira física que o biofilme forma são duas características a serem consideradas neste aspecto. (1) Foram identificadas recentemente duas enzimas glicosiltransferase (GT) (1-2), codificadas pelos genes epaI e epaOX, e envolvidas na formação dos biofilmes em Enterococcus faecalis. Esses dois genes integram o cluster gênico epa encontrado em Enterococcus faecalis e Enterococcus faecium. Apesar de testes bioquímicos realizados com as proteínas codificadas pelos genes, as estruturas dessas duas GTs e testes enzimáticos das mesmas não foram realizados. Sendo assim, o objetivo inicial do presente trabalho é resolver as estruturas dessas enzimas assim como as reações que elas catalizam. A finalidade desta pesquisa é para contribuir com mais informações sobre enzimas do tipo glicosiltransferase, uma vez que das 110.870 sequências depositadas no banco de dados CAZy 0,25% foram caracterizadas bioquimicamente e 0,01% com estruturas determinadas, e para amplificar o estudo do gênero Enterococcus, mais especificamente do cluster epa.

Palavras-chave: Biofilme. Resistência bacteriana. Cluster epa. Glicosiltransferase. E. faecalis.

Referências:

1 DALE, J. L. et al. Multiple roles for *Enterococcus faecalis* Glycosyltransferases in biofilm-associated antibiotic resistance, cell envelope integrity, and conjugative transfer. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 59, n. 7, p. 4094-4105, 2015. doi:10.1128/AAC.00344-15.

2 DALE, J. L. et al. Restructuring of *Enterococcus faecalis* biofilm architecture in response to antibiotic-induced stress. **NPJ Biofilms Microbiomes**, v. 3, p. 15, 2017. doi:10.1038/s41522-017-0023-4.

class=

PG44

Caracterização espectroscópica linear e não linear de moléculas de porfirinas ferroceno

COCCA, L. H. Z. [1]; SCIUTI, L. F. [1]; IGLESIAS, B. A. [2]; de BONI, L. [1]

leandro.cocca@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Química - UFSM

Durante as últimas décadas houve um grande aumento relacionado à pesquisas de materiais orgânicos envolvendo espectroscopia linear e não linear, isso é devido ao fato de tais materiais possuírem capacidade de serem empregados em diversas aplicações, entre as quais podemos citar: fotossensibilizadores em terapia fotodinâmica (PDT), fabricação de células solares orgânicas ou em desenvolvimento de dispositivos ópticos. (1) Moléculas de porfirina são boas candidatas para essas aplicações porque apresentam considerável absorção não linear na região UV-Vis, fácil síntese, com diferentes estruturas periféricas ou diferentes íons metálicos centrais, grande estabilidade térmica e também porque apresentam absorção saturada reversa (ASR) e absorção saturada (AS), ambas ao mesmo tempo, mas para diferentes comprimentos de onda. Neste trabalho, modelamos a dinâmica populacional entre estados eletrônicos singleto e tripleto, a fim de caracterizar as moléculas de porfirinas que apresentam a mesma estrutura central, mas diferem por suas estruturas periféricas. Utilizamos espectroscopia óptica linear para determinar a seção de choquel de absorção no estado fundamental para diferentes comprimentos de onda, bem como tempos de relaxação eletrônica e rendimento quântico de fluorescência. Técnicas não lineares espectroscópicas foram empregadas para determinar a seção de choque de absorção do estado excitado (varredura-Z por pulso único (2) e varredura-Z por luz branca (3)), seção de choque de absorção do estado tripleto de energia e taxa de cruzamento inter sistema (varredura-Z por trem de pulsos). As características fotofísicas em função da estrutura periférica, determinadas através das técnicas experimentais, demonstraram que as moléculas estudadas aqui são boas candidatas para limitação óptica devido à presença do mecanismo ASR, ou na fabricação de células solares devido à alta absorção de estados excitados.

Palavras-chave: Porfirinas. Varredura-Z. Espectroscopia populacional.

Referências:

1 CALVETE, M.; YANG, G. Y.; HANACK, M. Porphyrins and phthalocyanines as materials for optical limiting. **Synthetic Metals**, v. 141, n. 3, p. 231-243, Mar. 2004.

2 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, May 1990.

3 DE BONI et al. Excited state absorption spectrum of chlorophyll a obtained with white-light continuum. **Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 16, p. 165102-1-165102-4, Apr. 2007.

PG45

Estudo do Transporte Iônico e Eletrônico em Condutores Mistos Orgânicos

C., R. [1]

rcolucci@usp.br

Faria, G. C. [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos grandes diferenciais dos materiais semicondutores orgânicos é sua habilidade de suportar, em determinadas condições, transporte eletrônico e iônico simultaneamente. Está propriedade possibilita a tais condutores mistos sucesso em aplicações de interesse biológico, já que sistemas vivos se comunicam exclusivamente através de fluxos iônicos. O dispositivo escolhido para tais aplicações é o transistor eletroquímico orgânico (OECT), devido, entre outras características, ao seu alto poder de amplificação de sinais elétricos e iônicos. Apesar dos OECTs serem amplamente utilizados em diversas aplicações, seus mecanismos de funcionamento ainda são pouco compreendidos. Assim sendo, a proposta do presente projeto é o de realizar um extensivo estudo dos diversos parâmetros de um OECT utilizando um modelo do transiente da corrente de dreno, desenvolvido recentemente em nosso Grupo de Pesquisa (2017).[1] Para tal estudo, foram confeccionados OECTs com o polímero PEDOT:PSS como camada ativa. A resposta eletro-iônica desses dispositivos foram caracterizadas utilizando diversos eletrólitos aquosos, com concentração de 100 mM, a saber: NH4Cl, KCl, NaCl, CaCl2 e MgCl2. Os resultados demonstram que altas tensões de dreno interferem no campo elétrico responsável por levar os cátions para o interior do canal, favorecendo o acumulo de cargas próximo ao dreno e tornando o volume do material subutilizado. Sendo assim, o regime ideal de operação dos OECTs é $|Vd| < 0{,}1$ V e $|Vg| \leq 0{,}3$ V. Além disso, a resposta dos OECTs apresentam grande dependência com a espécie iônica que compõem o eletrólito. Observamos variações de até 40% na capacitância de um mesmo dispositivo ao variarmos a espécie iônica utilizada. Os resultados obtidos neste trabalho nos possibilitam propor diretrizes de operações para os OECTs, além de guias para otimizar a performance dos transistores.

Palavras-chave: Condutores mistos. OECT. Espécie iônica.

Referências:

1 - FARIA, G. C.; DUONG, D. T.; SALLEO, A. On the transient response of organic electrochemical transistors. **Organic Electronics**, v. 45, p. 215-221, 2017. /hrefhttps://doi.org/10.1016/j.orgel.2017.03.021doi.org/10.1016/j.orgel.2017.03.021.

PG46

A novel class of nanocarriers to enhance tumor immunogenicity

COMPARETTI, E. J. [1]; ZUCOLOTTO, V. [1]

edsoncomparetti@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

In 2020, cancer will cause 10 millions of deaths worldwide. Amid scientific and technological innovations that contribute for increasing patient survival, areas like nanomedicine and immunotherapy have the most satisfactory results. Currently, studies that encompass their knowledge create new modalities of therapies able to reduce tumor expansion and adverse effects of treatments. As the main biological characteristic of neoplasias, it highlights the ability to escape from immune surveillance and modulate the phenotype of healthy cells in order to boost its progression in the organism. (/hrefabout:blank1) In the blood, phagocytes cells prevent particles deposition in target tissues but also activate innate and adaptive immune response against the disease. (/hrefabout:blank2) The physicochemical properties of nanocomposites enhance the mechanisms of cellular immunity in lymphoid organs, circulatory system, and tumor mass, helping to restore leukocyte anticancer activity lost after exposure to suppressive stimuli. (/hrefabout:blank3) Considering that nanocarrier carry immunomodulatory agents, both to tumor cells and immunocompetent cells, we synthesize lipid nanoparticles with the main components from pancreatic tumor cell membrane (PANC-1) isolated by sucrose gradient centrifugation. First, we investigated its stability by dynamic light scattering (DLS - Zetasizer Nano ZS), nanoparticle tracking analysis (NTA - NanoSight NS300) and UV/visible spectroscopy. The cytotoxic activity on PANC-1 was confirmed by flow cytometry (BD FACSCalibur) after 24h incubation with nanoparticles in two experimental conditions: a) nanovesicle synthesised from plasma membrane (MNP) and b) equivalent concentration of synthetic liposomes (LNP). Analysis of cell viability was based on Annexin V (apoptosis) and 7AAD (cell death) labeling and analyzed by FlowJo software. Our preliminary results indicate excellent stability of nanovesicles in solution and low toxicity, favoring the incorporation of immunological adjuvants for future delivery of antigenic material to human immune cells, such as monocytes, dendritic cells, and lymphocytes. To establish a pro-inflammatory response, lipid nanoparticles will be incorporated with monophosphoryl lipid A and oligonucleotide sequence (siRNA or LNA) to silence a specific oncogene.

Palavras-chave: Nanomedicine. Immuno. Lipid nanoparticles. Immunomodulatory agents.

Referências:

1 BEATTY, G. L.; GLADNEY, W. L. Immune escape mechanisms as a guide for cancer immunotherapy. **Clinical Cancer Research**, v. 21, n. 4, p. 687-692, Feb. 2015.

2 ANSELMO, A. C.; MITRAGOTRI, S. Nanoparticles in the clinic. **Bioengineering and Translational Medicine**, v. 1, n. 1, p. 10-29, Mar. 2016.

3 SONG, H. et al. Injectable polypeptide hydrogel for dual-delivery of antigen and TLR3 agonist to modulate dendritic cells in vivo and enhance potent cytotoxic T-lymphocyte response against melanoma. **Biomaterials**, v. 159, p. 119-129, Mar. 2018. doi: 10.1016/j.biomaterials.2018.01.004.

PG47

Solitons and black holes in shift symmetric scalar tensor gravity

BRIHAYE, Y. [1]; HARTMANN, B. [2]; CÔNSOLE, F. [1]

felipe.console@usp.br

[1] Physique-Mathématique - Université de Mons-Hainaut, Belgium

[2] Instituto de Física de São Carlos - USP

This work is partially motivated by one of the biggest open problems in Theoretical Physics: Dark Energy. There's enough evidence that our observable universe consists of 95% of unknown types of matter (25%) and energy (70%), which goes by the name of dark matter and dark energy, respectively. One possible way to explain these open problems in Theoretical Physics, that has been extensively studied in the literature, is to modify our best theory of gravity that we have nowadays - Einstein's Theory of General Relativity (GR), in a very specific way such that we recover GR in a certain limit. GR is very well tested in the weak gravity regime (experiments in the solar system and astrophysical observations are very well described by GR) and strong regimes predictions are being tested in the present with the observations of gravitational waves being detected on Earth. These gravitational waves are believed to come from the fusion of two compact objects such as black holes or neutron stars and already have been used to rule out certain proposals for alternatives theories of gravity. One of the popular class of theories that have been proposed goes by the name os Scalar-Tensor theories of gravity. These are theories in which a scalar field is added in a specific way to the theory. Our idea to contribute to this question is to study compact objects that are solutions to this Scalar-Tensor gravity (1-2) and predict what is the behavior of such objects. More exactly, we're studying solitons and black holes in shift symmetric Scalar-Tensor theories of gravity with a U(1) gauge field.

Palavras-chave: Black holes. Solitons. Scalar-tensor gravity. Asymptotically anti-de Sitter.

Referências:

1 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B.; URRESTILLA, J. Solitons and black hole in shift symmetric scalar-tensor gravity with cosmological constant. **Journal of High Energy Physics**, v. 2018, n. 6, p. 074-1-074-14, June 2018.

2 HERDEIRO, C.; RADU, E. Anti-de-Sitter regular electric multipoles: towards Einstein-Maxwell-AdS solitons. **Physics Letters B**, v. 749, p. 393-398, Oct. 2015. doi: 10.1016/j.physletb.2015.08.010.

PG48

Biosensors based on immobilized folic acid molecules for cancer cells detection

CORREIRA, A. R. [1]; VIEIRA, N. C. S. [1]; ZUCOLOTTO, V. [1]

abilenesax@yahoo.com.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Folate receptors (FRs) are overexpressed on the surface of cancer cells but very low levels in normal tissues. FRs are folate binding proteins with a high affinity for folic acid (FA) K_d = 0.1-10 nM and a molecular weight of 38 kDa. (1) In recent years, folate receptor have been used as a strategic target in the detection and diagnosis of cancer. (2) We developed biosensors for the detection of HeLa (ovarian cancer cell) cell based on electrochemical platforms modified with folic acid. (3) The biorecognition layer of the biosensors had been modified with layer-by-layer (LBL) films of positively charged poly(allylamine hydrochloride) (PAH) and negative charged folic acid (FA). The films had been characterized using UV-Vis absorbance, FTIR, AFM. Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and cyclic voltammetry (CV) have been used for detection of HeLa cell. EIS and CV was performed via a three electrodes configuration, platinum foil, Ag/AgCl and ITO worked as counter, reference and work electrode, respectively. The developed sensor was able to detect folate receptors in solution at concentrations as low as 4 nM with a linear range up to 10 nM. A Limit of detection (LOD) value of 100 HeLa cells/mL was obtained in detection range from 10^2 to 10^6 cells/mL compared with similar previous studies. (3)

Palavras-chave: Folate receptors. Biosensors. Folic acid.

Referências:

1 CHEN, C. et al. Structural basis for molecular recognition of folic acid by folate receptors. **Nature**, v. 500, n. 7463, p. 486-489, 2013.

2 CASTILLO, J. J. et al. Detection of cancer cells using a peptide nanotube-folic acid modified graphene electrode. **Analyst**, v. 138, n. 4, p. 1026-1031, 2013.

3 TEPELI, Y. et al. An electrochemical cytosensor based on a PAMAM modified glassy carbon paste electrode. **RSC Advances**, v. 5, n. 66, p. 53973-53978, 2015.

PG49

Desenvolvimento de heterojunções dos sistemas BiVO4, Fe2Ti O5 e WO3 para a formação de eletrodos aplicados na fotossíntese artificial para geração de hidrogênio solar

CORRÊA, A. S. [1]; GONÇALVES, R. V. [1]

andressacorrea@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

As consequências ambientais e econômicas do uso de combustíveis fósseis têm promovido o aumento da demanda de produção de combustíveis renováveis por rotas eficientes. Nesse contexto, temos o hidrogênio, combustível com alta densidade energética, renovável e sem carbono, podendo ser gerado a partir da quebra da molécula da água (fotossíntese artificial, FA). (1) Esse processo específico de geração de hidrogênio é também denominado fotossíntese artificial. Dentre os materiais utilizados para esse fim, podemos destacar a Fe2Ti O5, que atua como um semicondutor do tipo n, apresentando posições adequadas das bandas de energia para a reação completa da quebra da molécula da água em H2 e O2 de forma estequiométrica. No entanto, devido à sua elevada energia de *bandgap* a atividade fotocatalítica apresenta-se restrita à região ultravioleta do espectro solar. Dessa forma, a estrutura na qual a Fe2Ti O5 está presente facilita a separação entre o par elétron-buraco e então leva a uma otimização da performance do sistema. Essa é uma estratégia que vem sendo muito utilizada nos processos de fotossíntese artificial (*water splitting*). (2) No presente estudo, serão produzidos filmes finos para produção de heterojunções de BiVO4, Fe2Ti O5 e WO3 para a formação de eletrodos aplicados na fotossíntese artificial para geração de hidrogênio solar. Desse modo, parâmetros tais como homogeneidade superficial (por MEV), confirmação da obtenção de fase cristalina (por DRX e Raman) e *bandgap* (UV-VIS), serão avaliados de forma a obter um sistema de elevado rendimento na produção de H2, ou seja, alto desempenho da atividade fotocatalítica.

Palavras-chave: Fotossíntese artificial. Heterojunções.

Referências:

1 SOUZA, F. L.; LEITE, E. R. (Eds.) **Nanoenergy**: nanotechnology applied for energy production. 2nd ed. Cham: Springer International Publishing, 2018. 330 p.

2 BASSI, P. S. et al. Crystalline Fe2O3/Fe2TiO5 heterojunction nanorods with efficient charge separation and hole injection as photoanode for solar water oxidation. **Nano Energy**, v. 22, p. 310-318, Apr. 2016.

PG50

Desenvolvimento de uma metodologia para o estudo de biomassa lignocelulósica aliando ressonância magnética nuclear em alto e baixo campo e análise multivariada

CUNHA, G. P. [1]; ESPÍRITO SANTO, M. C. [1] FILGUEIRAS, J. G. [1]; AZÊVEdo, E. R. [1] POLIKARPOV, I. [1]

giovanni.p@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Nas ultimas décadas biomassas lignocelulósicas, i.e. extratos de origem vegetal constituídos de Celulose, Hemicelulose e Lignina, tem atraído crescente interesse tecnológico e científico. Esta vasta classe de materiais encontrou as mais diversas aplicações, dentre as quais a mais proeminente é a produção de biocombustíveis, como o Etanol, através da fermentação de açucares produzidos pela hidrólise enzimática da Celulose. (1) Lignina e Hemicelulose, no entanto, conferem resistência ao ataque enzimático, de maneira que as amostras devem ser pré-tratadas para remoção destas componentes. Tal procedimento, no entanto, gera resíduos sólidos ainda energeticamente ricos e liquores, estes últimos sendo bons candidatos a fonte de químicos para a indústria. (2) Com o intuito de melhor a eficiência destes processos apresentamos no presente trabalho uma metodologia para o estudo de biomassas lignocelulósicas que alia técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) em alto e baixo campo e técnicas de análise multivariada. RMN é uma poderosa técnica para a análise de matéria orgânica, no entanto, a complexidade e vastidão desta classe de materiais torna os espectros complicados e convolutos. Deste modo, técnicas de edição espectral. e.g. filtros de anisotropia de deslocamento químico, seleção de grupos CH e CH₂, técnicas baseadas em diferenças nos tempos de relaxação T₁ e T₂ e técnicas de Análise Multivariada, como Principal Componenet Analysis (PCA) e Multivariate Curve Resolution (MCR) são de extrema valia para a diminuição de ambiguidades. (3) Resultados preliminares mostram uma diferenciação visível caracterizada pela remoção de Lignina e Hemicelulose nos espectros de CPMAS em alto campo para seis diferentes tipos de pré-tratamentos: ácidos, alcalinos, ácidos + alcalinos, hidrotérmicos, autohidrólise e organosolv. Medidas de relaxometria em RMN de baixo campo apontam para a existência de três regimes distintos de tamanho de poros acessíveis e correlação direta entre os tamanho dos mesmos e a diminuição da recalcitrância ao ataque enzimático. Mostramos ainda que através da aplicação de PCA conseguimos separar claramente quais grupos químicos são removidos pelos diferentes tratamentos tanto nas amostras sólidas quanto nos liquores.

Palavras-chave: Biomassa lignocelulósica. Ressonância Magnética Nuclear. Análise multivariada.

Referências:

1 AGBOR, V. B. et al. Biomass pretreatment: fundamentals toward application. **Biotechnology Advances**, v. 29, n. 6, p. 675-685, Nov-Dec. 2011.

2 AKHTAR, J.; IDRIS, A.; AZIZ, R. A. Recent advances in production of succinic acid from lignocellulosic biomass. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 98, n. 3, p. 987-1000, Feb. 2014.

3 MAO, J. et al. Advanced solid-state NMR spectroscopy of natural organic matter. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 100, p. 17-51, May 2017. doi:

10.1016/j.pnmrs.2016.11.003.

PG51

Estabilidade de fases ordenadas do modelo de Heisenberg-Kitaev em um campo magnético

CONSOLI, P. M. [1]; ANDRAde, E. C. [1]

pedro.consoli@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Em 2006, A. Kitaev apresentou a solução exata de um modelo anisotrópico de spins-1/2 na rede favo de mel. (1) Seu trabalho e a percepção decorrente de que o sistema considerado consiste em um líquido de spin quântico inauguraram uma busca intensa por materiais que podem ser descritos pelo hamiltoniano proposto. Uma vez que sua origem física foi compreendida, tornou-se claro que a interação de Kitaev surge de forma complementar à de Heisenberg em isolantes de Mott com acoplamento spin-órbita forte. (2) Enquanto as propriedades do modelo de Heisenberg-Kitaev resultante foram extensivamente estudadas, várias questões relacionadas aos efeitos introduzidos por um campo magnético externo permanecem abertas. Assim, aplicamos aqui análises de onda de spin lineares a fim de estudar fases conhecidas como "canted zigzag"e "canted stripy"(3) em um campo orientado na direção [100]. Além de apresentar dispersões para ambos os casos, construímos um diagrama de fase modificado que inclui fases magnéticas desordenadas originadas por flutuações quânticas. Por fim, sugerimos que o mesmo formalismo seja empregado para investigar fases mais complexas que surgem em campos paralelos à direção [111]. Em particular, candidatos interessantes para estudos futuros são duas fases de vórtices(3) cujas configurações clássicas quirais podem indicar a existência de modos de borda, uma típica assinatura de fases topológicas.

Palavras-chave: Acoplamento spin-órbita. Líquidos de spin. Heisenberg-Kitaev. Campo magnético externo. Ondas de spin.

Referências:

1 KITAEV, A. Anyons in a exactly solved model and beyond. **Annals of Physics**, v.321, n.1, p.2-111, 2006.

2 CHALOUPA, J.; JACKELI, G.; KHALIULIN, G. Zigzag magnetic order in the Iridium Oxide Na2IrO3. **Physical Review Letters**, v.110, n.9, p.097204, 2013.

3 JANSSEN,L.; ANDRADE, E.; VOJTA, M. Honeycomb-lattice Heisenberg-Kitaev model in a magnetic field: spin canting, metamagnetism, and vortex crystals. **Physical Review Letters**, v.117, n.27, p.277202, 2016.

PG52

Investigação de um condensado de Bose-Einstein dipolar em uma armadilha tipo bolha

DINIZ, P. de C.[1]; HENN, E. de L. [1]

pedro.diniz@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste trabalho é a investigação teórica de gases quânticos bosônicos com interações dipolares em potenciais de aprisionamento do tipo bolha(1-2), onde os átomos são confinados dentro de uma casca esférica. Dentro deste objetivo geral, há objetivos parciais, a saber: (i) cálculo das energias de interação para a distribuição homogênea de densidade, (ii) cálculo das distribuições de densidade de equilíbrio para as aproximações mais simples de casca esférica infinitamente estreita e aproximação de Thomas-Fermi (energia cinética desprezível), (iii) situações limite de raio da casca esférica muito grande e/ou dipolos muito pequenos. Tal geometria despertou muito interesse no último ano devido à inauguração de um sistema de experimentação em átomos frios na estação espacial internacional.(3) Em tal sistema experimental pretende-se realizar a configuração da armadilha bolha em átomos sem interação dipolar em ambiente de microgravidade. Apesar do interesse recente, não há na literatura estudo de gases dipolares nessa geometria. Por sua vez, gases dipolares são um dos principais tópicos de pesquisa experimental em átomos frios nos últimos 10 anos, especialmente devido à obtenção experimental de gases quânticos de Érbio e Disprósio, este último a espécie atômica mais magnética da Tabela Periódica.Os resultados esperados do presente projeto contemplam as distribuições de densidade de equilíbrio e as energias do estado fundamental do sistema. Os resultados obtidos, especialmente nas distribuições de densidade não podem ser comparados com nenhum resultado da literatura de forma direta. A melhor análise que poderá ser feita é a de comparar resultados-limite com resultados existentes na literatura para os sistemas representados pelas situações limite. Qualquer outra análise das distribuições de densidade e energia do estado fundamental calculadas devem ser feitas com base na experiência e na razoabilidade de tais quantidades. Dessa forma, cálculos de energia não podem ter valores imaginários e distribuições de densidade tem que ser contínua e espelhar a geometria do sistema e das interações.Os resultados esperados do presente projeto contemplam as distribuições de densidade de equilíbrio e as energias do estado fundamental do sistema. Os resultados obtidos, especialmente nas distribuições de densidade não podem ser comparados com nenhum resultado da literatura de forma direta. A melhor análise que poderá ser feita é a de comparar resultados-limite com resultados existentes na literatura para os sistemas representados pelas situações limite. Qualquer outra análise das distribuições de densidade e energia do estado fundamental calculadas devem ser feitas com base na experiência e na razoabilidade de tais quantidades. Dessa forma, cálculos de energia não podem ter valores imaginários e distribuições de densidade tem que ser contínua e espelhar a geometria do sistema e das interações.

Palavras-chave: Gases quânticos . Condensados de Bose-Einstein. Armadilha dipolar.

Referências:

1 SUN,K. et al. Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A**, v.98, n.1, p.013609, 2018.

2 PADAVIC, K.; SUN, K.;LANNERT, C.; VISHVESHWARA, S. Physics of hollow bose-einstein conden-

sates. **Europhysics Letters,** v.120, n.2, p.20004, 2017.

3 COLD ATOM LABORATORY. **The Coolest Spot in the Universe.** Disponivel em:< http://coldatomlab.jpl.nasa.gov.>. Acesso em: 11 set. 2018. http://coldatomlab.jpl.nasa.gov.>. Acesso em: 11 set. 2018.

PG53

Caracterização de proteínas relacionadas à síntese e degradação do segundo mensageiro c-di-GMP em Pseudomonas aeruginosa

deLPHITO, L. [1]; NAVARRO, M. V. A. S. [1]

leonardodelphito@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A regulação de diferentes processos celulares importantes de bactérias, como progressão do ciclo celular, formação de biofilme, mobilidade e virulência é realizada pelo dinucleotídeo cíclico c-di-GMP. (1) Dentre esses processos, a transição do estilo de vida livre para o biofilme possui grande relevância médica, sendo estimado que 80% das doenças bacterianas em humanos são infecções biofilme-associadas. A formação do biofilme é vantajosa por conferir as bactérias: proteção física do sistema imune e de antibióticos, adesão para formar sítios de infecção e coordenação para expressão simultânea de fatores de virulência, entre outras. (2) Descrito pela primeira vez em 1987, o segundo mensageiro c-di-GMP é sintetizado intracelularmente, dado um estímulo externo ou interno, a partir de duas moléculas de GTP. Tal síntese ocorre por intermédio de diguanilato ciclases (DGCs) que possuem o domínio GGDEF, e a degradação da molécula é realizada por fosfodiesterases (PDEs) com domínio EAL ou HD-GYP. Uma vez sintetizado ele atua alostericamente sobre moléculas efetoras que agem sobre alvos que conduzirão a uma resposta fenotípica, como por exemplo: formação de flagelo, transcrição de genes, produção de exopolímeros da matriz do biofilme. Vários efetores são controlados por esse mesmo mensageiro, o que levanta a questão de como um estimulo específico leva a uma resposta específica, sendo que o c-di-GMP, uma vez sintetizado, poderia se difundir por todo o citoplasma e interagir com diversos efetores gerando as mesmas respostas independente do estímulo. (1) Hipóteses surgiram para tentar explicar como a especificidade nesse sistema de sinalização ocorre: poderia ser decorrente de síntese localizada próxima ao efetor seguida de degradação do c-di-GMP logo após a interação; ou decorrente da afinidade de cada efetor ao c-di-GMP; ou de uma rede de interações entre as diversas proteínas que sintetizam, degradam e recebem o c-di-GMP; ainda uma combinação dessas hipóteses também seria possível. (1,3) Alguns estudos apontam para a existência dessa rede de interações proteícas. (3) Objetivando ajudar a elucidar o mecanismo desse mensageiro bacteriano esse projeto busca a caracterização estrutural e de interação das proteínas com domínios PAS, GGDEF e EAL, PA0169, PA3825, PA0285 e PA0575 que, a partir de estudos *in vivo*, interagem com força significativa e devem fazer parte dessa rede de proteínas.

Palavras-chave: c-di-GMP. Pseudomonas aeruginosa. Rede de interação proteíca.

Referências:

1 RÖMLING, U.; GALPERIN, M. Y.; GOMELSKY, M. Cyclic di-GMP: the first 25 years of a universal bacterial second messenger. **Microbiology and Molecular Biology Reviews**, v. 77, n. 1, p. 1-52, 2013.

2 FLEMING, D.; RUMBAUGH, K. P. Approaches to dispersing medical biofilms. **Microorganisms**, v. 5, n. 2, p. 15-1-15-16, 2017.

3 SARENKO, O. et al. More than enzymes that make or break cyclic di-GMP-local dignaling in the interactome of GGDEF/EAL domain proteins of Escherichia coli. **mBio**, v. 8, n. 5, p. e01639-17-1-

e01639-17-18, 2017.

PG54

Two-photon absorption studies of BODIPY-like compounds based on BF2-naphthyridine complexes

DIPOLD, J. [1]; doNNELLY, J. [2]; ROMERO, E. E. [2]; CALHEIRO, T. P. [3]; BONACORSO, H. G. [3]; IGLESIAS, B. A. [4]; SIQUEIRA, J. P. [1]; HERNANdeZ, F. E. [2, 4]; de BONI, L. [1]; MENdoNÇA, C. [1]

jessica.dipold@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Department of Chemistry - University of Central Florida

[3] Departamento de Química - UFSM

[4] College of Optics and Photonics, CREOL - University of Central Florida

Boron dipyrromethenes (BODIPYs) molecules are molecules with a wide range of applications (1), from laser dyes to sensitizer for solar cells. However, the nonlinear properties of these molecules are usually low (2), presenting two-photon absorption cross-sections of around 50 GM, which limits their uses for further studies in this optical regime. It is possible to increase the two-photon absorption cross-section of molecules by either increasing their conjugation length or the charge transfer within the molecule by adding either electron-donor or electron-withdrawal groups in them. Here, we study the two-photon absorption spectra of seven novel BF_2-napthyridine based boron-complexes which have been synthesized to increase their nonlinear properties through the addition of electron-donor and electron-withdrawal groups to a boron dipyrromethene core. We measured the two-photon absorption cross-section spectra for all molecules through the absorptive Z-scan technique (3), modeling the obtained data with a sum-over-states model. DFT calculations were also carried out to predict the shape and magnitude of the two-photon transitions. The calculated spectra shapes matched the measured ones, even though the predicted magnitude were higher than the observed ones. The maximum cross-section among the studied molecules was of 268 GM, showing an improvement in respect to previously studied BODIPYs molecules and an interesting potential for applications on nonlinear optics for both visible and infrared spectral regions.

Palavras-chave: Naphthyridines. Two-photon absorption. Density function theory.

Referências:

1 ZIESSELI, R.; ULRICH, G.; HARRIMAN, A. The chemistry of Bodipy: a new El Dorado for fluorescence tools. **New Journal of Chemistry** v. 31, n.4,p.496-501,2007.

2 WANG, Y. C. et al. Nonlinear optical properties and ultrafast dynamics of three novel boradiazaindacene derivatives. **Journal of Applied Physics ,** v.108, n.3, p. 033520, 2010.

3 SHEIKBAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26 , n.4,p. 760-769,1990.

PG55

Optoelectronic properties of an organic light harvesting capacitor

LIMA FILHO, J. B. [1]; MIRANda, P. B. [1]

joaquimbrasil@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, a new architecture for organic photovoltaic devices is investigated. Known as the Light Harvesting Capacitor (LHC), it differs from the usual ones because its photogenerated charges drive the external potential without the need of being collected. (1-2) The charges are stored in nano-dipoles within the dielectric layer when the device is illuminated. With this feature, the LHC is expected to present advantage over the usual photovoltaic devices which have their efficiency limited by charge transport issues. Following the worldwide interest looking for feasible organic devices, in this work the LHC was built by layer-by-layer self-assembly technique. The polymers poly(allylamine hydrochloride) and poly(sodim 4-styrenesulfonate) were used as insulating bilayers, the polymer poly [3-(sodium-6 hexanoate) thiohphene-2, 5-diyl] as electron donor and the organic molecule N,N'-bis(6-aminohexyl)-3,4,9,10-perylenediimide as electron acceptor. Preliminary results obtained from multistack LHCs that were built with up to 50 active bilayers sandwiched by insulating bilayers are presented. Layer-by-layer led to very thin film with average thickness of $\approx 1.5\ \mu\mathrm{m}$. Optical and electronic characterizations with UV-Vis spectroscopy, continuous wave Photoinduced Absorption spectroscopy, impedance spectroscopy, and Photocurrent showed that the LHC works, but presents low efficiency of $\approx 0.01\%$0.01%.

Palavras-chave: Organic electronics. Light harvesting capacitor. Continuous wave photoinduced absorption spectroscopy. Impedance spectroscopy. Photocurrent.

Referências:

1 PORRO, M. et al. Multiscale simulation of organic heterojunction light harvesting devices. **COMPEL**: the international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering, v. 33, n. 4, SI, p. 1107-1122, 2014.

2 GARBUGLI, M. et al. Light energy harvesting with nano-dipoles. **Nanoscale**, v. 4, n. 5, p. 1728-1733, 2012.

PG56

Fabricação de estruturas fotônicas em As2S3 via escrita direta com pulsos laser de femtossegundos LIFT em filmes finos de Trissulfeto de arsênio

ALMEIda, F. P. [1]; ALMEIda, J. M.P. [1]; MENdoNÇA, C. R. [1]

flavio.pin.filho@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Estruturas fotônicos estão inseridas em uma nova classe de dispositivos ópticos e possibilitam a manipulação da radiação eletromagnética graças à sua organização periódica. Tais estruturas, na forma de cristais fotônicos, podem ser encontradas na natureza como opalas e asa de borboletas. Por outro lado, também podem ser fabricadas em laboratório. As características que os compõem, como índice de refração, dimensão e formato proporcionam um controle sobre a luz, tendo várias aplicações tecnológicas como, por exemplo, transmitir informações por grandes distancias sem perdas por absorção ou *chips* totalmente ópticos, revolucionando a computação. Neste trabalho realizamos a fabricação de cristais fotônicos utilizando pulsos laser de aproximadamente 50 femtossegundos produzidos por um oscilador laser de cavidade estendida, focalizado por uma objetiva de microscópio na amostra montada sobre um estágio de translação controlado por computador. Utilizando a técnica de Laser induced forward transfer (LIFT) em filmes finos de A_2S_3,(1) determinamos as condições para uma deposição controlada e periódica de nanoestruturas. Através de uma análise de Fourier dos padrões obtidos determinamos que as estruturas apresentam dimensões da ordem de 200 nm em regiões micrométricas. Através da simulação computacional utilizando o método de elementos finitos, determinamos que a estrutura produzida apresenta uma *bandgap* em 700 nm, possibilitando o desenvolvimento de guias fotônicos que operam nesse comprimento de onda.

Palavras-chave: CristaisfFotônicos. LIFT. Elementos finitos.

Referências:

1 ALMEIDA, J. M.P.; PAULA, K.; ARNOLD, C. B.; MENDONÇA, C. Sub-wavelength slf-organization of chalcogenide glass by direct laser writing. **Optical Materials** , v.84, p.259-262, 2018./hrefhttps://doi.org/10.1016/j.optmat.2018.06.068doi.org/10.1016/j.optmat.2018.06.068.

PG57

Desenvolvimento de tecnica combinando fotobiomodulação e radioterapia para otimização da resposta tumoral à radiação ionizante

FARIA, C. M. G. de[1]; INAda, N. M. [1]; PRATAVIEIRA, S.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

claramgf@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A fotobiomodulação (PBM), técnica usada clinicamente há mais de quarenta anos, consiste na aplicação de luz com o objetivo de modificar processos celulares como proliferação, reparação tecidual e analgesia. Esses efeitos são fortes evidências de que a PBM pode atuar na modulação do ciclo celular e aumento da oxigenação tecidual, fatores determinantes no resultado de um tratamento de radioterapia. (1) A terapia fotodinâmica (TFD) consiste na interação entre fotossensibilizador, luz e oxigênio molecular; que combinados causam morte celular. A radioterapia, por sua vez, é uma técnica já consagrada clinicamente que utiliza radiação ionizante para o tratamento de tumores. Portanto, nesse projeto é proposta a investigação da combinação dessas técnicas para desenvolvimento de um protocolo que aumente o dano tumoral e a eficácia dos tratamentos. O modelo tumoral utilizado é de câncer de cavidade oral, com a linhagem humana de carcinoma epidermóide SCC-25, e a indução in vivo será feita em camundongos nude. Foi observado in vitro, em cultura monocamada dessa linhagem celular, que a iluminação de 780nm com dose de 5J/cm2 antes da incubação de 4h com Photogem© aumentou a morte celular comparado ao grupo terapia fotodinâmica. O objetivo desses experimentos é avaliar a combinação das técnicas *in vitro* e em um modelo animal, de maior complexidade biológica, e avaliar dano tumoral e sobrevida dos animais no intuito de propor um protocolo que possa melhorar a resposta tumoral à radiação ionizante e à TFD.

Palavras-chave: Fotobiomodulação. Radioterapia. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1 DE FREITAS, L. F.; HAMBLIN, M. R. Proposed mechanisms of photobiomodulation or low-level light therapy. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Eletronics**, v.22, n.3, p.7000417, 2016. doi:10.1109/JSTQE.2016.2561201.

PG58

Optical thermometry based on Nd3+-doped fluorophosphate glasses

FARIA, W. [1]

walter.faria@usp.br

GONÇALVES, T. S. [1]

CAMARGO, A. S. S [1]

[1]Instituto de Física de São Carlos- USP

Optical sensors have drawn much attention in the last decade as candidates for temperature sensing in environments where the standard contact sensors are ineffective, such as power stations (strong electromagnetic fields), electronic circuits and biological cells (sub-micron scale). (1) Optical temperature sensors can also be applied when fast and long-distance measurements are required. These devices can be based on changes in the fluorescence properties of its constituting material, e. g., excited-state lifetime and emission intensity. The fluorescence intensity ratio (FIR) technique (2) is one the most successful methods employed in optical temperature sensing. FIR compares the emissions from two thermally coupled electronic levels of the material's emitting center, usually some trivalent lanthanide ion. Neodymium (Nd3+) is of special interest since its emission bands: i) don't show great overlap; ii) lie in the near-infrared optical biological window. Nd3+-doped and Nd3+/Yb3+-codoped fluorophosphate glasses with excellent optical and spectroscopic properties (3) are employed as the temperature sensing material. The Nd3+ emissions centered in 800 nm and 870 nm are recorded by a portable spectrometer and a LabView software makes the spectra adjustments and calculations necessary for the temperature determination. Relative sensitivities as high as 2% K -1 are obtained for the single doped system. The inferior performance of the codoped system is also discussed.

Palavras-chave: Spectrocopy. Thermometry. Lanthanide. Glass.

Referências:

1 BRITES, C. D. S. Thermometry at the nanoscale. **Nanoscale**, v 4, n. 16, p. 4799, 2012

2 WADE, S.A.;. COLLINS, S. F.; BAXTER, G.W. Fluorescence intensity ratio technique for optical fiber point temperature sensing. **Journal of Applied Physics**, v. 94, n. 8, p. 4743, 2003

3 GONÇALVES, T. S. et al. Structure-property relations in new fluorophosphate glasses singly- and co-doped with Er^{3+} and Yb^{3+}. **Materials Chemistry and Physics**, v. 157, n. 1, p. 45-55, 2015

PG59

Análise estrutural e biofísica das septinas de drosophila melanogaster

FERNANdeS, A. F.[1]; LEONARdo, D. A. [1]; PEREIRA, H.M. [1]; GARRATT, R. C. [1]

adriano.fernandes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

As Septinas são proteínas conhecidas originalmente por serem responsáveis pela formação do septo, estrutura responsável pelo estrangulamento no final da divisão celular, separando em duas partes o conteúdo citoplasmático (1). Posteriormente foi verificado que estas proteínas possuem diversas outras funções celulares. As septinas são encontradas em fungos e animais, mas não em plantas. Apresentam como principais características a presença de um domínio conservado de ligação aos nucleotídeos de guanina (GTP) e a formação de filamentos homo- e hetero-oligoméricos, que são estruturas altamente organizadas (2). As septinas estão envolvidas em diversas funções celulares nas quais se encontram associadas à membrana plasmática, como a citocinese, exocitose, fagocitose, tráfego de vesículas e etc (3). A principal característica das septinas reside na sua polimerização, fato que promove a formação de complexos hetero-oligoméricos altamente organizados, que podem resultar em estruturas do tipo filamentos, anéis e redes. Para os estudos de septinas deste projeto de doutorado, foi escolhido como organismo modelo Drosophila melanogaster, ou mosca-da-fruta, que é uma espécie de inseto díptero. Esta espécie possui cinco genes da septina, incluindo os dois membros do subgrupo SEPT2, SEPT6 e SEPT7. As septinas possuem a capacidade de interagir com fosfolipídios específicos nas membranas, sendo a região polibásica (hélice-α 0) indicada como responsável por essa interação (3). Apesar do conhecimento dos genes relativos às septinas de Drosophila melanogaster, ainda há carência nos estudos de interação na formação de complexos que formam filamentos, interações com outras proteínas, nem mesmo informações estruturais destas septinas. Deste modo, este projeto visa a realização de estudos que possibilitem uma maior compreensão do mecanismo de interação das septinas de Drosophila melanogaster bem como a elucidação de suas informações estruturais por cristalografia de proteínas e difração de raios-x.

Palavras-chave: Septinas. Drosophila melanogaster. Interação proteína-proteína.

Referências:

1 HARTWEEL, L. H.; CULOTTI, J.; REID, B.: Genetic control of the cell-division cycle in yeast. I. detection of mutants. **Proceedings of the National Academy of Sciences USA**, v. 66, n. 2, p. 352-359, 1970.

2 HARTWELL, L. H.: Genetic control of the cell division cycle in yeast. IV. genes controlling bud emergence and cytokinesis. **Experimental Cell Research**, v. 69, n.2, p. 265-276, 1971.

3 BYES, B.; GOETSCH, L. A highly ordered ring of membrane-associated filaments in budding yeast. **Journal of Cell Biology**, v. 69, n. 3, p. 717-721, 1976.

PG60

Complex networks computational modeling of visual attention

FERREIRA, S. J. V. [1]; COSTA, L. F. [1]

silviojvf@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Visual attention is a complex cognitive process where individuals select the most relevant and informative stimuli to understand the environment, thus reducing information processing time and improving interaction skills. Computational modeling approaches to visual attention propose that saliency maps are built from bottom-up visual features in the scene context, highly determining the attentional focus trajectory. Furthermore, these maps may be complemented by top-down cognitive aspects of information processing such as pattern recognition and the visual task nature. The majority of saliency maps are obtained through computer vision feature extraction and some of these techniques utilises complex networks characterization of images for saliency map extraction, but we have few studies with a complex networks approach into built saliency maps. (1) In our study we modeled the attentional focus trajectory as a complex network derived from saliency maps of atificial scenes. Salient regions in the scene corresponded to nodes whose connections corresponded to attentional focus displacement probabilities. Connections were weighted both by bottom-up visual feature interactions and top-down pattern recognition and task demands. We studied how topological and dynamic measurement (2) of these complex networks can lead to prediction of attentional focus displacement and compared our approach to traditional saliency models and visual attention literature.

Palavras-chave: Visual attention. Saliency. Complex networks.

Referências:

1 BORJI, A.; ITTI, L. State-of-the-art in visual attention modeling. **IEEE Transactions on Pattern Analisys and Machine Intelligence**, v. 35, n. 1, p. 185-207, 2013.

2 COSTA, L. F. et al. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.

PG61

πFlowMT – Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores many-core</h3>

FERREIRA, F. [1]
felipe2.ferreira@usp.br
TRAVIESO, G. [1]
RUGGIERO, C. A. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

É uma questão de tempo até que os processadores do tipo many-core estejam amplamente disponíveis no mercado. Esses processadores possuem uma grande capacidade de processamento bruta, mas, em contrapartida, devido ao elevado número de núcleos de processamento – que podem variar de centenas a milhares –, é muito difícil fazer uso pleno desta capacidade. (1) Para extrair toda a capacidade de processamento disponível, devido à natureza "von neumanniana"presente na arquitetura da grande maioria dos processadores convencionais, é necessário a utilização de operações de sincronização para garantir a coerência dos dados durante o acesso à memória por mais de um núcleo de processamento (2), utilizar essas operações de maneira eficiente é uma tarefa que requer uma alta perícia do usuário. Dadas as dificuldades apresentadas é natural que novos modelos sejam desenvolvidos e especializados para a tarefa de extrair toda a capacidade de processamento dos processadores many-core. Modelos de execução dirigido pelos dados são ótimas alternativas para esta tarefa: nesses modelos a execuções de instruções é feita através da disponibilidade de suas entradas, com isso a necessidade de realizar operações explícitas de sincronização é eliminada e o paralelismo inerente do programa é obtido automaticamente, já que todas as instruções aptas para a execução podem ser executadas em paralelo. πFlowMT é um modelo desenvolvido que utiliza os conceitos de fluxo de dados através das entradas e saídas presentes nos codelets – estrutura de dados que possuí três elementos fundamentais: um conjunto de entradas, uma função e um conjunto de saídas. O modelo busca a utilização de funções com granularidade grossa nos codelets – o grau da granularidade indica a quantidade de trabalho necessário para a realização de uma tarefa –, isso permite que os custos de comunicação entre os codelets, decorrentes do fluxo de dados, sejam diluídos nos custos de execução das funções. A análise do modelo é feita considerando a comparação direta entre o modelo desenvolvido e modelos já consolidados no mercado – OpenMP, Intel Threading Building Blocks e OmpSs – através da implementação e execução de diversos algoritmos nos modelos citados. A execução dos algoritmos é feita em um simulador (3): além de ser um ambiente controlado e isolado é possível simular processadores de difícil acesso que ou ainda não estão disponíveis no mercado ou que possuem um custo muito elevado. Os resultados obtidos demonstram que o modelo desenvolvido consegue ser competitivo na comparação com os modelos de estado da arte e, em específico, durante a simulação de processadores do tipo many-core.

Palavras-chave: Paralelismo. Many-core. Fluxo de dados.

Referências:

1 BATTEN, C. et al. Building manycore processor-to-DRAM networks with monolithic silicon photonics. In: SYMPOSIUM ON HIGH PERFORMANCE INTERCONNECTS, 16., 2008, Stanford. **Proceedings** ... Stanford: IEEE, 2008. p. 21-30. doi: 10.1109/HOTI.2008.11.

2 MORRISON, A. Scaling synchronization in multicore programs. **QUEUE,** v. 14, n. 4, 2016. doi:

10.1145/2984629.2991130.

3 SANCHEZ, D.; KOZYRAKIS, C. ZSim: fast and accurate microarchitectural simulation of thousand-core systems. In:INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTER ARCHITECTURE,40., 2013,Tel-Aviv. **Proceedings**... New York: ACM, 2013. p. 475-486. doi: 10.1145/2508148.2485963.

PG62

Avaliação de linhagens bacterianas termohalofílicas isoladas de óleo e rocha de reservatório de petróleo para a produção de biossurfactante

FERREIRA, J. F. [1]; BOSSOLAN, N. R. S. [1]

jakeline.ferreira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes (BS) são compostos de origem microbiana que exibem propriedades surfactantes distribuindo-se em interfaces óleo/água capazes de diminuírem as tensões superficiais e interfaciais. Essas propriedades os tornam agentes emulsificantes, detergentes, dispersantes e/ou espumantes, sendo atrativos para diferentes setores industriais. Na indústria petrolífera podem ser empregados em formulações de óleos lubrificantes; na biorremediação; na dispersão no derramamento de óleos; na remoção e mobilização de resíduos de óleo de estocagem e na recuperação melhorada de petróleo (MEOR). (1) As vantagens ecológicas: biodegradabilidade, baixa toxicidade e atividade em ambientes de temperatura e salinidade elevadas, tornam-se atrativas a sua produção em larga escala nestas aplicações.O presente trabalho objetiva selecionar linhagens bacterianas produtoras de BS a partir de amostras isoladas de óleo e rochas de um reservatório *offshore* localizado no sudeste do Brasil, tendo vistas à aplicação em processos de MEOR. Pretende-se estudar as condições ótimas nos parâmetros de temperatura, salinidade, fonte de carbono, fonte de nitrogênio e relação carbono/nitrogênio, avaliar as propriedades tensoativas do(s) biossurfactante(s) com relação a redução de tensão superficial e interfacial e de inversão de molhabilidade. Até o presente momento, realizou-se a triagem dentre 14 bactérias termohalofílicas previamente isoladas, avaliando-se o crescimento em meio líquido durante 7 dias consecutivos, a partir de medidas de densidade óptica (DO), e a capacidade emulsificante de extratos livres de célula. Utilizou-se os testes de E_{24} (Índice de emulsificação após 24 horas), no qual são avaliadas a estabilidade e a altura da camada de emulsão formada a partir do contato de dois líquidos de diferentes polaridades (2mL de querosene e 2mL da amostra). Medidas de tensão superficial também foram feitas realizadas em tensiometro automático de força (*Attension* Sigma701), tendo a água ultrapura como medida de referência. Os cultivos bacterianos foram feitos em meio LB com salinidade ajustada para 35 ou 70 g/L de NaCl, de composição (g/L): triptona (10,0), extrato de levedura (5,0) e NaCl (5,00). As temperaturas de incubação variaram das linhagens isoladas do óleo (37°C) e as isoladas de rocha (55°C). Os resultados se mostraram promissores para duas bactérias: uma linhagem isolada de óleo (O27-2) e a outra isolada de rocha (Ar35D5). Embora os valores da redução das tensões superficiais não tenham se mostrado promissores para a seleção das linhagens, os testes de emulsificação permitiram melhor triagem. A linhagem O27-2 forneceu valor médio de E_{24} de 55% em 144 h de cultivo e DO máxima de 1,93. Já em Ar35D5 o índice de emulsificação E_{24} médio em 120 horas de cultivo foi de 64% e DO de 2,23. Visa-se para as próximas etapas: (a) padronização dos inóculos, (b) ensaios de crescimento em diferentes condições de temperatura, salinidade e agitação; (c) testes de produção de BS em Meio Mineral com diferentes fontes de carbono e nitrogênio, (d) avaliação das propriedades tensoativas (tensão superficial, tensão interfacial e capacidade de inversão de molhabilidade) dos BS semi-purificados.

Palavras-chave: Biossurfactante. Bactérias termohalofílicas. MEOR.

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, 2006.

PG63

Estudo de sistemas Fermiônicos polarizados via espaços métricos

PICOLO, T. de [1]; FRANÇA, V.V . [2] ; OLIVEIRA, L. N. [1]

tati.picolif@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Intituto de Química - UNESP

A transição entre a fase supercondutora FFLO e a fase normal (não supercondutora) em sistemas com população de spin desbalanceada ainda tem seus limiares debatidos na literatura. Para estudar a coexistência da supercondutividade com o magnetismo em sistemas quânticos é necessário um método numérico para calcular as funções densidade do sistema. Para isto, cálculos via DMRG (Grupo de Renormalização da Matriz Densidade) permitem resultados exatos para as funções densidade. A análise dessas funções pode ser feita utilizando uma propriedade pouco explorada do espaço de Hilbert: a propriedade métrica. Com ela é possível definir distâncias (1), onde é esperado que funções densidade de sistemas físicos muito distintos tenham distâncias no espaço métrico muito maiores do que para sistemas similares. O estudo de distâncias exige uma definição do referencial de cálculo utilizado, para isto é necessária uma análise profunda sobre como as distâncias se comportam de acordo com o referencial utilizado.Essa análise levou ao estudo da simetria entre as distâncias, onde sistemas que não possuem a superfluidez exótica tendem a apresentar um comportamento simétrico em relação a um referencial central, enquanto os sistemas com a fase FFLO tem uma assimetria nítida em relação a esse sistema de referência, mostrando que é possível estudar a transição utilizando os espaços métricos.Essa análise levou ao estudo da simetria entre as distâncias, onde sistemas que não possuem a superfluidez exótica tendem a apresentar um comportamento simétrico em relação a um referencial central, enquanto os sistemas com a fase FFLO tem uma assimetria nítida em relação a esse sistema de referência, mostrando que é possível estudar a transição utilizando os espaços métricos.

Palavras-chave: Transição de fase. Supercondutividade. Espaços métricos.

Referências:

1 D'AMICO, J.; COE, V.; FRANÇA,V.; CAPELLE, K.Quantum mechanics in metric space: wavefunctions and their densities. **Physical Review Letters,** v.106, n.5, p. 050401, 2011.

PG64
Construction of binary black hole and soliton space-times

etevaldo.s.costa@usp.br
COSTA FILHO, E. S. [1]; HARTMANN, B. (1)
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Due to the recent observations of the gravitational waves in space time with two compact sources, we decided to study solutions of the Einstein equations with many bodies. In particular, our interest is to describe the spacetime of two Kerr black holes with different masses in general relativity. The construction of exact axisymmetric solutions of the Einstein-Maxwell equations possessing the prescribed physical properties means the obtaining of solutions in which different parameters would correspond to different relativistic multipole moments determining the structure of space-time. In order to construct analytical solutions of the Einstein-maxwell equations, the Sibgatullin's integral method (1) is applied to construct a family of N-soliton solutions of the Einstein-Maxwell equations whose Ernst potentials and the corresponding metric functions are obtained in a simple determinant form, in which 3N arbitrary complex parameters correspond to 6N arbitrary relativistic multipole moments . The construction of the solution for two arbitrary Kerr sources separated by a massless strut in a completely physical parametrization may be considered as an important new contribution into the list of physically meaningful spacetimes of Einstein's general relativity. We are convinced that a more general binary configuration of arbitrary sources separated by massless strut can be also rewritten in terms of physical parameters.

Palavras-chave: General relativity. Soliton. Kerr black holes.

Referências:

1 MANKO, V. S.; SIBGATULLIN, N. R. Construction of exact solutions of the Einstein-Maxwell equations corresponding to a given behaviour of the Ernst potentials on the symmetry axis. **Classical and Quantum Gravity**, v. 10, n. 7, p. 1383-1404, 1993.

PG65

Study of interaction between calibrated water, oil and carbonatic rocks by non-linear vibrational spectroscopy

PALMA FILHO, N. B. [1]

nicolau.palma94@gmail.com

MIRANDA, P. B. [1]

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Nowadays there are many industries exploring the "pre-salt" oil reservoirs to supply the future energy needs and thereby new studies have appeared to enhance the extraction with several strategies, including the low salinity water injection (LSWI). There is a large body of recent research in the literature about oil recovery by low salinity water injection spanning approximately the last 17 years.(1) Several coreflood experiments have shown that LSWI may, but not always, increase oil recovery compared with conventional seawater-flood. Here we propose a novel study with sum-frequency generation vibrational spectroscopy (SFG) to investigate the oil-water-rock interactions at the molecular level, aiming at the understanding of the role of water salinity on the rock wettability by water against oil, which could lead to improvement in the oil recovery. SFG spectroscopy is a nonlinear optical technique that can provide important information about the chemical nature of an interface by its vibrational spectrum, and about the average molecular orientation, with sub-monolayer sensitivity. (2) This technique relies on broken inversion symmetry, which naturally occurs at interfaces between two isotropic media such as gases, liquids and a large number of solids. Initially we will use SFG spectroscopy to perform a detailed study of calcite and dolomite surfaces, which are model rocks for the reservoir that we are interested in. Afterwards, studies of surface cleaning by low salinity water (up to the level of the last monolayer) of the rock surfaces contaminated by a model oil (octanoic acid) will be performed. Similar strategies have been reported with organic solvents instead of low salinity water.(3) Preliminary results for the surface structure of calcite and its cleaning by low salinity water will be presented. It is expected to find a low salinity water concentration capable of completely removing the model oil from the rocks, thus enhancing oil recovery in these reservoirs.

Palavras-chave: Oil recovery. Low salinity. SFG spectrocopy.

Referências:

1 SOHRABI, M. et al. **Novel insights into mechanisms of oil recovery by use of low-salinity-water injection**. 2015. p. 407-416. Disponível em: <https://www.onepetro.org/download/conference-paper/SPE-172778-MS?id=conference-paper%2FSPE-172778-MS>. Acesso em 23 jan. 2017.

2 SHEN, Y. R. Surfaces probed by nonlinear optics. **Surface Science**, v. 299-300, p. 551–562, 1994. doi.org/10.1016/0039-6028(94)90681-5.

3 YANG, Z. et al. Binary solvents with ethanol for effective bitumen displacement at solvent/mineral interfaces. **Energy Fuels**, v. 29, n. 7, p. 4222-4226, 2015.

PG66

Construção de fermentador múltiplo para otimização da expressão de proteínas recombinantes

THIEMANN, O. T. [1]; STELMASTCHUK, L. B. F. [1]

laure@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A produção de proteínas recombinantes para as aplicações terapêutica, veterinária e agrícola é uma tecnologia muito empregada e bem sucedida. O processo depende da definição das condições adequadas de crescimento celular e de indução da expressão de proteínas, o que requer um meticuloso experimento de varredura de condições para que o aumento da escala de produção possa ser feito. O emprego de automação na produção de proteínas em um formato miniaturizado e de alta capacidade permite aos pesquisadores conduzir experimentos de maior complexidade, uma vez que é capaz de processar um maior número de amostras e condições diferentes simultaneamente. Para estudos de biologia estrutural, a definição de condições de expressão para obtenção de proteínas corretamente enoveladas partir de uma construção gênica ainda é um processo extenso. Ainda que muitos métodos de alta capacidade estejam disponíveis, o equipamento necessário para experimentos de expressão paralela de proteínas é caro e restrito à instalações onde apenas profissionais com treinamento técnico podem operá-lo. Este projeto descreve a construção de um equipamento de alta capacidade personalizável e economicamente viável para produção de proteínas recombinantes com o uso de impressão 3D e software/hardware livre. (1) O protótipo está sendo desenvolvido com a finalidade de monitorar e ajustar as condições de propagação celular em culturas bacterianas, onde temperatura, pH, oxigenação e densidade celular podem ser controlados em um número personalizado de amostras e volumes. Para tanto, a adição programada de reagentes será parte das funções do bioreator, o que possibilita ao usuário modificar as condições iniciais do experimento. Todas as funções do bioreator serão controladas por uma placa Arduino Mega (microcontrolador Atmega 2560) e uma Raspberry Pi 3 será usada para o processamento de dados e interface do usuário.Os componentes estruturais do equipamento foram modelados em programas do tipo CAD e impressos 3D utilizando uma impressora RepRap para FDM e uma Peopoly Moai para fotopolimerização. O desenvolvimento de ferramentas que empregam software/hardware livre para biotecnologia pode beneficiar as condições de pesquisa com soluções de baixo custo e abordagens relativamente simples. (2) Dessa forma, este projeto tem o intuito de possibilitar o uso de um equipamento de alta capacidade mesmo em laboratórios menores viabilizando mais estudos por diminuir os custos experimentais que envolvem expressão de proteínas para diversas aplicações.diminuir os custos experimentais que envolvem expressão de proteínas para diversas aplicações.

Palavras-chave: Proteínas recombinantes. Biorreator. Automação laboratorial. Software/hardware livre.

Referências:

1 BADEN, T. et al. Open labware: 3-D printing your own lab equipment. **PLoS Biology,** v. 13, n. 3, p. e1002086-1-e1002086-12, 2015.

2 PEARCE, J. M. **Open-source lab:** how to build your own hardware and reduce research costs. Amsterdan: Elsevier, 2014.

PG67

Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente

FORTUNATO, T. C. [1]; MORIYAMA, L. T. [1]

thereza.fortunato@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Quando a luz incide sobre um tecido biológico, ela pode sofrer diferentes tipos de interação: reflexão, refração, espalhamento, transmissão e absorção. A forma como a luz interage com um tecido depende das características ópticas e estruturais do tecido. (1-2) Nas fototerapias e nos procedimentos de fotodiagnóstico, a dosimetria é geralmente feita com base em dados empíricos e experiências divulgadas em artigos científicos, pouco se faz para personalizar a dosimetria na prática clínica, embora seja conhecido que a cor, hidratação e rugosidade da superfície do tecido possam influenciar na propagação da luz. Nesse trabalho foram realizadas simulações computacionais da interação da luz com um meio túrbido homogêneo cujas propriedades ópticas são equivalentes às da derme da pele. As simulações foram feitas utilizando o método de Monte Carlo e, para isso, a implementação desenvolvida por Fang e Boas (3) denominada de MCXLAB. O objetivo do presente estudo é avaliar como a propagação da luz dentro do meio túrbido depende do acoplamento da luz em sua superfície. Para isso, nas simulações, considerou-se a existência de uma camada de material acima do meio túrbido, com diferentes características ópticas. Os resultados mostram que a adição de um material transparente acima do meio túrbido altera o formato da propagação da luz, e esse formato depende do índice de refração e da espessura do material adicionado.

Palavras-chave: Fototerapia. Fotodiagnóstico. Dosimetria de luz.

Referências:

1 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions**: fundamentals and applications. 2nd rev. ed. Berlin: Springer-Verlag, 2013.

2 TUCHIN, V. V. (Ed.) **Handbook of optical biomedical diagnostics**. Bellingham: SPIE Press, 2007.

3 FANG, Q.; BOAS, D. Monte Carlo simulation of photon migration in 3D turbid media accelerated by graphics processing units. **Optics Express**, v. 17, n. 22, p. 20178-20190, 2009.

PG68

Scaling of correlation functions of the random XX spin-1/2 chain

GETELINA, J. C. A. [1]; HOYOS NETO, J. A. [1]

getelina@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The strong-disorder renormalization group (SDRG) is a numerical method for studying random systems that has been shown to be extremely successful. From all the many applications of SDRG, it is for the random XX spin-1/2 chain that the method shows its full potential: The SDRG gives an asymptotically exact analytical solution. (1) This solution is also valid for the more general random XXZ model, within a given anisotropy range. Recently, however, two studies have contested the SDRG predictions, with the results obtained from scaling theory (2) and quantum Monte Carlo. (3) These studies argue the existence of a logarithmic correction to the scaling of spin-spin correlation functions, which, according to SDRG, is a universal power-law scaling. In this work, we study the spin-spin correlation functions of the random XX spin-1/2 chain via an exact numerical diagonalization of the Hamiltonian. Using higher numerical precision, we verified a universal power-law decay of the average correlation function, as predicted by the SDRG method. Therefore, recent claims of logarithmic corrections to the scaling are not consistent with our data. We have verified that the typical correlation function decays as a stretched exponential with the distance when measured with respect to the associated localization length. In addition, the associated exponent prefactor of the respective scaling function does not vary significantly with disorder. Finally, we also show that the universal correlation function distribution weakly violates the single-parameter scaling theory.

Palavras-chave: Correlation functions. Disordered systems. Spin chains.

Referências:

1 FISHER, D. S. Random antiferromagnetic quantum spin chains. **Physical Review B**, v. 50, n. 6, p. 3799-3821, 1994.

2 IGLÓI, F.; JUHÁSZ, R.; RIEGER, H. Random antiferromagnetic quantum spin chains: exact results from scaling of rare regions. **Physical Review B**, v. 61, n. 17, p. 11552-11568, 2000.

3 SHU, Y.-R. et al. Properties of the random-singlet phase: from the disordered Heisenberg chain to an amorphous valence-bond solid. **Physical Review B**, v. 94, n. 17, p. 174442-1-174442-14, 2016.

PG69

Análise numérica da transferência defFrequência de um neurônio integra-e-dispara

GEWERS, F. L. [1]; COSTA, L. F. [1]

felipe.gewers@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O sistema nervoso é extremamente complexo e de vital importância para um grande numero de seres, incluindo o ser humano. Apesar disso ainda há muito para se descobrir sobre seu funcionamento. Isso é devido em grande parte a sua grande complexidade e as dificuldades envolvidas na realização de experimentos. Uma maneira utilizada para se estudar o sistema nervoso é através de simulações numéricas (1). Nesse caso, utilizam-se modelos para a dinâmica de diferentes tipos de neurônios que são integrados em sistemas com topologias próximas às esperadas para o sistema nervoso. É conhecido que a frequência dos potenciais de ação é uma das formas em que a informação é codificada em um sistema neuronal (2). Desse modo, foi realizado um estudo de como a frequência instantânea dos potenciais de ação de entrada e de saída se relacionam em um modelo de neurônio integra-e-dispara (3). Utilizando de simulações numéricas é possível verificar um comportamento aproximadamente linear para as relações possíveis entre frequência de entrada e saída em que a qualidade do ajuste varia com os parâmetros do modelo. Desse modo criou-se uma divisão do espaço dos parâmetros do modelo de acordo com a linearidade da transferência de frequência. Com isso é evidenciado o comportamento do modelo para o caso de se ter conhecimento somente da frequência instantânea dos potenciais de ação, e além disso a divisão do espaço de parâmetros é útil para a simplificação da dinâmica do sistema em certos regimes e ao custo de um erro controlado.

Palavras-chave: Integra-e-dispara. Redes neuronais biológicas. Sistema nervoso. Redes neurais. Neurônio.

Referências:

1 BRETTE, R. et al. Simulation of networks of spiking neurons: a review of tools and strategies. **Journal of Computational Neuroscience**, v. 23, n. 3, p. 349-398, Dec. 2007.

2 GERSTNER, W.; KISTLER, W. M. **Spiking neuron models**: single neurons, populations, plasticity. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

3 BURKITT, A. N. A review of the integrate-and-fire neuron model: homogeneous synaptic input. **Biological Cybernetics**, v. 95, n. 1, p. 1-19, July 2006.

PG70

Medindo o Xmax de chuveiros atmosféricos extensos com telescópios Cherenkov

GILER, A. G. D. [1]; SOUZA, V. [1]

andres.delgado@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Os chuveiros atmosféricos extensos (extensive air showers, EAS por sua sigla em inglês) são cascatas de partículas secundarias geradas pelos raios gama ou raios cósmicos quando penetram na atmosfera terrestre e interagem com as moléculas do ar. (1) As partículas secundárias podem ser elétrons, pósitrons, múons, antimúons, gamas entre outros. Um observável importante dos EAS é a profundidade na qual temos o máximo número de partículas (X_{max}). A localização do desenvolvimento máximo de um EAS na atmosfera depende dos processos que governam o desenvolvimento longitudinal daquele chuveiro. O X_{max} depende das propriedades associadas as interações hadrônicas e eletromagnéticas envolvidas, portanto o X_{max} depende da energia e do tipo de partícula primária. Determinar a localização do X_{max} permite estudar os EAS e os processos de interação, estudar a composição de raios cósmicos (2), e verificar se os processos hadrônicos e eletromagnéticos envolvidos nas simulações em energias acima das disponíveis em aceleradores feitos pelo homem. Neste trabalho, elaboramos uma proposta para determinar o X_{max} dos EAS utilizando telescópios Cherenkov. Os telescópios Cherenkov estudam os EAS medindo a luz que é gerada pelas partículas secundarias, chamada de radiação Cherenkov. (3) Cada telescópio Cherenkov contém espelhos onde os fótons Cherenkov são refletidos em direção a um sensor óptico (PMT) localizado no foco do telescópio. A orientação dos telescópios permite associar uma profundidade (ou altura) na atmosfera para cada pixel do sensor óptico, portanto para cada fóton Cherenkov podemos associar uma profundidade na atmosfera. A primeira parte do trabalho foi simular EAS gerados por gammas, prótons e ferros de 300 TeV, 100 TeV, 30 TeV com um ângulo zenital de 20 graus e um ângulo de azimute aleatório entre 0 e 360 graus. Os pacotes computacionais usados foram CORSIKA para os EAS e telsimarray para os telescópios. A simulação completa nos oferece a direção dos fótons Cherenkov que chega em cada telescpopio. Com essa informação, foi posível projetar os fótons Cherenkov num plano do chuveiro que contem o caminho da partícula primária. Nós reconstruímos histogramas bidimensionais que contem a distribuição longitudinal e lateral da posição aparente onde os fótons Cherenkov foram gerados. Como resultado, nós estudamos o $X_{max}{}^{Cherenkov}$ em função da posição do telescópio e encontramos que para telescópios posicionados a distâncias maiores que 120 m do eixo do chuveiro, existe uma correlação entre o $X_{max}{}^{Cherenkov}$ e o X_{max}. Fizemos um ajuste linear entre o $X_{max}{}^{Cherenkov}$ e o X_{max} para EAS gerados por partículas primárias da mesma energia, obtendo uma resolução na reconstrução do X_{max} de aproximadamente 30 g cm^{-2} no pior dos casos. O próximo passo será verificar nossa proposta com dados de um telescópio Cherenkov.

Palavras-chave: Chuveiros atmosféricos extensos. Profundidade. Desenvolvimento máximo.

Referências:

1 GRIEDER, P. K. F. Hadron initiated air showers In: textbfExtensive air showers: high energy phenomena and astrophysical aspects.Berlin: Springer Verlag,2010.p. 3-23. doi: 10.1007/978-3-540-76941-5.

2 SOUZA, V. et al. Measurements of the depth of maximum of air-shower profiles at the Pierre Auger

Observatory and their composition implications. In: EUROPEAN COSMIC RAY SYMPOSIUM, 25., 2016, Turin. **Proceedings...** Stanford: SLAC National Accelerator Laboratory, 2017.eConf C16-09-04-1-C16-09-04-4.

3 GRIEDER, P. K. F. Atmospheric Cherenkov radiation. In: **Extensive air showers**: high energy phenomena and astrophysical aspects. Berlin: Springer, 2010.p.835-842. doi: 10.1007/978-3-540-76941-5.

PG71

Nonlinear optical microscopy by nonlinear ellipse rotation: study of gorilla glass and polycrystalline semiconductor

GOMES, J. A. C. [1]; BARBANO, E. C. [2]; MISOGUTI, L. [1]

jorge_coura@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Federal do Paraná

In microscopy, it is interesting to use different contrasts to provide diverse information about an analyzed sample. Nonlinear optical processes are some of explored phenomena which provide special contrasts. These phenomenons occur when the response of the material to the optical field applied depends nonlinearly on the intensity of the incident beam. (1) Furthermore, the use of nonlinear optical processes is one approach used in the 3D optical microscopy. Various nonlinear optical processes are used in microscopy; for example, second-harmonic generation, third-harmonic generation, fluorescence induced by two-photon absorption, etc. However, among the refractive optical nonlinear effects, there is the nonlinear ellipse rotation (NER), a nonlinear process which has never been used in microscopy. Here, we propose to map the nonlinear refractive index (n_2) of gorilla glass (GG) and polycrystalline semiconductors like zinc selenide (ZnSe). GG is a thin alkali-aluminosilicate glass made by corning designed to be strong and scratches resistant commonly used as cell phone screen protector. The resistance of type of glass is obtained by chemically strengthened process consisting in replacing sodium by potassium ions at the glass surface. Since potassium ions are larger than the sodium ions, the surface (core) of the glass will be at compression (tension) state. In this way, it is interesting to know if the exchange between sodium and potassium modify the glass refractive nonlinear index. We measured the n_2 of GG as a function of depth and we could see a small change at surface. ZnSe has interesting characteristic for calibration: high refractive nonlinearity, a polycrystalline nature with grain size of 60 μm, compatible to resolution microscopic and because it is an isotropic material, that is, there is no light scattering. In our nonlinear microscopy, we developed high precision NER measurements using a rotating polarizer and a dual phase lock-in at tight focused beam condition. (2) We used a similar experimental setup of the *z*-scan, wherein was used a *xyz* axes system for mapping the sample. It was possible observe grains inside of the polycrystalline matrix because nonhomogeneous nonlinear signal of each grain, probably related to crystallographic orientation.

Palavras-chave: Nonlinear optics. Gorilla glass. Microscopy. Nonlinear ellipse rotation.

Referências:

1 BOYD, R. W. **Nonlinear Optics**. 3th ed. New York: Academic Press, 2008. 613p.

2 MIGUEZ, M. L. et al. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick sample. **Applied Physics B Applied Physics B**, v. 120, n. 4, p. 653-658, 2015.

PG72

Desenvolvimento de protótipos portáteis de imagens de fluorescência para aplicações médicas.

GOVONE, A.B.[1]; CASTRO NETO, J. C.[1]

govone.angelo@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Sistemas de detecção de linfonodo sentinela são utilizados por médicos para reduzir a quantidade de pacientes submetidos ao processo de ressecção total de linfonodos durante a cirurgia de ressecção tumoral. Dentre as técnicas empregadas no rastreamento de linfonodos sentinela, destaca-se a fluorescência de campo amplo, que consiste em irradiar um fármaco que absorve a irradiação em determinado comprimento de onda e após algumas reações químicas, emite radiação em outro comprimento de onda. Desta forma, é possível detectar pequenas concentrações de fármaco em determinado corpo(1).Os sistemas de fluorescência consistem em excitar a amostra do fármaco em determinado comprimento de onda (luz), e analisar a radiação (também luminosa) emitida por esta amostra. Estes dados indicam ao cirurgião a região de interesse para abordagem cirúrgica.O sistema de rastreamento de campo amplo é portátil e totalmente sem fios, conta com um sistema de excitação luminosa na região de absorção do fármaco (λ = 780 nm) e uma câmera equipada com um filtro que barra o comprimento de excitação da amostra, permitindo a captação apenas do sinal fluorescente emitido pela amostra. A imagem é projetada em um monitor através de transmissão por rádio frequência, onde o rádio emissor está no protótipo e o receptor está no monitor.A alimentação do sistema é feita por pilhas recarregáveis. A fonte de carga é uma fonte desenvolvida para conversão de 80-230 V AC para 13,0 V DC.A excitação é feita por LEDs de 3W elétricos, alimentados por fonte conversora e retificadora de 12 V DC para 2,3 V DC com pico de emissão em 780 nm.A captação deste sinal é realizada com uma câmera com alta sensibilidade à região de interesse (λ = 850 nm) ligada a um sistema de processamento de imagens capaz de transformar os dados coletados em imagens diagnósticas.As imagens geradas são visualizadas em um monitor que pode estar fixo ao equipamento ou remoto, próximo ao cirurgião.Os dados coletados por este sistema serão comparados ao sistema comercial existente no Hospital Sírio Libanês, parceiro do desenvolvimento do protótipo, em imagens realizadas durante as cirurgias, onde os pacientes deverão assinar termo de consentimento.Os dados coletados por este sistema serão comparados ao sistema comercial existente no Hospital Sírio Libanês, parceiro do desenvolvimento do protótipo, em imagens realizadas durante as cirurgias, onde os pacientes deverão assinar termo de consentimento.

Palavras-chave: Indocianina verde. linfonodo sentinela. Fluorescência. Câncer. Tumor.

Referências:

1 VIEIRA,R. A. da C. et al. Linfonodo sentinela intramamário comprometido e axila livre: esvaziamento axilar ou conduta conservadora? **Revista Brasileira de Ginecologia e Obstetricia**, v.34,n.10,p.478-482, 2012.

PG73

Photodegradation analyse for PpIX using LEDs blue and red. Estimation of dose of singlet oxygen using explicit dosimetry for PDT

SÁNCHEZ, V. [1]

victor.sanchez01@usp.br

ROMANO, R. A. [1]
REQUENA, M. B. [1]
GARCIA, M. [1]
PRATAVIEIRA, S. [1]

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The aim of this study is evaluating the theoretical feasibility of a white light source for photodynamic therapy (PDT). The first part of this work is to study the photodegradation of protoporphyrin IX (PpIX), when it irradiated with sources of two wavelengths [1]. The final part is the theoretical generalization for white light and generation of dose of singlet oxygen (Dose $^1O_2$). (1-2) The analysis of the photodegradation of PpIX is carried out by three experiments, in each of the experiments we made a solution of 5 μM of PpIX in DMSO. The solutions are irradiated with blue and red LEDs. Respectively the experiments 1, 2 and 3 are: LED blue-on red-off, LED blue-off red-on and LED blue-red-on. After an irradiation time the absorbance is measured, from these data, the degradation time is determined for each of the maximum peaks. The irradiation time is calculated in such a way that the solution absorbed 1x10^{19} photons.cm^{-3}. To estimate the Dose $^1O_2$ and time degradation of PpIX, a mathematic model is developed from the rate equations present in the type II mechanism of PDT. This model incorporates the interaction between light, PpIX and oxygen. (2-3) The initial conditions for the simulation of the model are the experimental measurements at t=0 s of the absorbance and emission spectrum of the two LED. The experiment results of photodegradation of PpIX has relation with the theoretical result, therefore, with this analytical model is possible to predict the Dose $^1O_2$ for white light.

Palavras-chave: PDT. Explicit dosimetry. PpIX. Singlet oxygen. Absorbance.

Referências:

1 VIGNION-DEWALLE, A. S. et al. Comparison of three light doses in the photodynamic treatmrnt of actinic keratosis using mathematical modeling. **Journal of Biomedical Optics**, v. 20, n. 5, p. 058001, 2015. .

2 LIU, B.; FARRELL, T.J.; PATTERSON, M.S. A dynamic model for ALA-PDT of skin: simulation of temporal and spatial distributions of ground-state oxygen, photosensitizer and singlet oxygen. **Physics in Medicine and Biology**, v. 55, n. 19, p. 5913-5932, 2010..

3 WANG, K.K.H. et al. Explicit dosimetry for photodynamic therapy: macroscopic singlet oxygen modeling. **Journal of Biophotonics**, v. 3 n. 5-6, p. 304-318, 2010.

PG74

Correlation effects in the emergence of bound state in the continuum

GUESSI, L. H. [1]; OLIVEIRA. L. N. [1]

lhbguessi@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

In 1929, a nontrivial solution of the Schrödinger equation proposed by von Neumman and Wigner identified a new class of states, called Bound States in the Continuum (BICs), that have localized wave function even though they are immersed in a continuum. (1) In this work, we explore theoretically the emergence of BICs in a system comprising two identical quantum dots side-coupled to a quantum wire. The dots are symmetrically coupled to the site at the center of the wire and to its next neighbors. (2) As the system is invariant under exchange of the dots, we take advantage of parity symmetry and work with the bonding and the anti-bonding levels resulting from the symmetric and antisymmetric combinations of the dot levels. Preliminary analysis within the Hubbard I approximation has identified a BIC in the noninteracting limit, that is washed out by electronic correlation. (3) To verify that finding, we have diagonalized the Two-Impurity Anderson Hamiltonian with the Numerical Renormalization Group (NRG) method. Our results confirm that the anti-bonding orbital is a BIC in the non-interacting limit ($U = 0$). For $U \neq 0$, the anti-bonding orbital is indirectly coupled to the continuum via the spin-spin interaction and spin-flip mechanism between the bonding and anti-bonding orbitals. In addition, we find that, if the coupling is particle-hole asymmetric, the ground state can be strongly affected by the RKKY interaction and the hybridization effects. (i) For weakly asymmetric couplings, the magnetic moments of the quantum dots couple ferromagnetically to form a triplet that is subsequently screened by the Kondo cloud. (ii) For intermediate asymmetry, the magnetic moments couple anti-ferromagnetically to form a singlet, suppressing the Kondo effect. (iii) For strong coupling, the correlation effects become less important, the anti-bonding orbital is reduced to a singly occupied level that is decoupled from the continuum, i.e., a bound spin state in the continuum. </pre>

Palavras-chave: Bound state in the Continuum (BIC). Numerical Renormalization Group (NRG).

Referências:

1 HSU, C. W. et. al. Bound states in the continuun. **Nature Reviews Materials**, v. 1, n. 9, p. 16048. 2016. doi: 10.1038/natrevmats.2016.48.

2 SERIDONIO, A. C. et. al. Thermal dependence of the zero-bias conductance through a nanostructure. **EPL**, v.86, p.67006, 2009.doi:10.1209/0295-5075/86/67006.

3 GUESSI,L. H. et. al. Quantum phase transition triggering magnetic bound states in the continuum in graphene.**Physical Review B**, v.92, n.24,p.045409,2015.

PG75

Obtenção, caracterização e avaliação de novas formas sólidas cristalinas de fármacos usados no tratamento da Alzheimer.

GÁMEZ, Y. M. [1]

ymatosg31@gmail.com

ELLENA, J. A. [1]

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A Pentoxifilina (*3,7 dihidrometil-1-5-oxo-hexil-1H-purina-2,6-diona*, PTF) é uma metilxantina com propiedades hemorreológicas e relaxantes da musculatura lisa, principalmentea nível vascular periférico. É amplamente utilizada no tratamento de disturbios circulatórios de natureza isquêmica (claudicação intermitente, doença vascular periférica, úlcera vascular do membro inferior). (1) Este insumo farmacêuticoativo (IFA) tem uma alta solubilidade nos mais variados solventes, o que é desfavorável para garantir uma concentração plasmática constante e, consequentemente, a eficacia terapêutica. O presente trabalho apresenta a busca pela padronização de um protocolo de síntese supramolecular de novas formas sólidas multicomponentes da PTF com coformadores orgânicos reconhecidos como seguros pela lista liberada pelo órgão de regulamentação *Food and Drug Admnistration* (FDA). Nesta busca, destacou-se nos testes iniciaiso ácido succínico (SUC). A reação se desenvolveu em meio aquoso, em uma razão molar estequiométrica 1PTF:1SUCC, em ambiente mantido à 25 °C. O material policristalino resultante foi analisado através da técnica de difração de raios X por policristais, espalhamento Raman e pelas análises térmicas de DSC e TGA, os quais mostraram diferenças quando comparados com os dados obtidos para o material de partida. Posteriormente, mais testes de cristalização serão realizados com o intuito de obter monocristais viáveis para a elucidação estrutural por difração de raios X, bem como sua síntese em maior quantidade para avaliar os perfis de solubilidade e dissolução, e também a estabilidade a longo prazo e em condições adversas (alta umidade e temperatura).(2) Espera-se que, pelas técnicas da Engenharia de Cristais, a obtenção de novas formas sólidas, tais como cocristais, possam reduzir a solubilidade com o objetivo de diminuir a taxa de dissolução, o que proporcionaria uma liberação mais lenta após a administração do comprimido contendo este IFA. Com o maior tempo de permanência na circulação sistêmica, a PTF continuaria apresentando sua ação farmacológica de forma efetiva, entretanto, sem a necessidade de doses de renovação bem como o uso de comprimidos com altas dosagens, que é a realidade do tratamento atual. (3)

Palavras-chave: Pentoxifilina. Insumo farmacêutico ativo. Ácido orgânico. Difração de raios X por policristais. Solubilidade.

Referências:

1 ARMIJO, J. A.; FLOREZ, J.; MEDIAVILLA, A. **Farmacología humana**. 3a ed. Barcelona: MASSON, 1997.

2 DINIZ, L. F. et al. Novel isoniazid cocrystals with aromatic carboxylic acids: crystal engineering, spectroscopy and thermochemical investigations. **Journal of Molecular Structure**, v.1153, p. 58-68, 2018. doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.09.115.

3 SPINELLI, F. et al. Molecular salts of the antidepressant venlafaxine: an effective route to solubility properties modifications. **Crystal Growth & Design**, v. 17, n. 8, p. 270-4279, 2017.

PG76

Nonlinear features of femtosecond laser written waveguides in Gorilla© Glass and their structural properties

HENRIQUE, F. R. [1]; ALMEIda, G. F. B. [1]; MARTINS, R. J. [1]; ROSA, R. G. T. [1]; SIQUEIRA, J. P. [1]; ANDRADe, M. B. [1]; MENdoNÇA, C. R. [1]

francielerenata@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Gorilla© Glass is an alkali aluminosilicate glass often used as protective screen in mobile devices due to its increased mechanical properties related to the compression layer created during an ion exchange process. (1) Recent studies also showed that Gorilla© Glass is a promising material for the production of waveguides by fs-laser direct writing, prompting its use as platform for photonic devices. (2) As large intensities are often found in integrated photonic devices, the nonlinear optical characterization of such waveguides is necessary for their effective application. The nonlinear refractive index of bulk Gorilla© Glass was previously characterized and found to be 3.3×10^{-20} m^2/W. (3) However, the characterization of the fs-laser written waveguides is still necessary, as the material modification caused by fs-laser irradiation is not completely understood. This way, the goal of this work is the characterization of the nonlinear index of refraction (n_2) of fs-laser written Gorilla© Glass waveguides by the Dispersive-scan (D-scan) technique. Our results showed that the waveguides n_2 is lower than the bulk material n_2. Its value also depends on the writing parameters. We found waveguides n_2 from 3 to 47 times lower than the bulk n_2, depending on the writing pulse energy. Raman spectroscopy measurements in the irradiated material showed changes in the band centered at 1078 cm^{-1} that is related to non-bridging oxygens (NBOs). The intensity decrease and broadening of the NBOs band can mean a decrease in quantity of NBOs and changes in their bonding angles, which can explain the reduction of the nonlinear refractive index.

Palavras-chave: Glass waveguides. Nonlinear optics.

Referências:

1 BALL, P. Material witness: concrete mixing for gorillas. **Nature Materials**, v. 14, n. 5, p. 472, 2015.

2 LAPOINTE, J. et al. Making smart phones smarter with photonics. **Optics Express**, v. 22, n. 13, p. 15473-15483, 2014.

3 ALMEIDA, G. F. B. et al. Third-order optical nonlinearities in bulk and fs-laser inscribed waveguides in strengthened alkali aluminosilcate glass. **Laser Physics**, v. 28, n. 1, p. 015401-1-015401-5, 2018.

PG77

Entendendo a origem (matemática e física) do Efeito Aharonov-Bohm

ISRAEL, I.[1]; MAIA, L. P.[1]

iagoisrael1@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Mesmo com sua previsão teórica e medição experimental (ver, por exemplo, (1-2), o significado físico do efeito Aharonov-Bohm ainda é muito debatido pela comunidade física.Desde a publicação do trabalho seminal de Sir Michael Berry em 1984, as fases geométricas tornaram-se grandezas bem populares em física teórica. Enquanto a maioria dos não especialistas depara-se com esse tema apenas ao estudar em livros-texto a evolução cíclica e adiabática de um Hamiltoniano dependente do tempo, na verdade a fase de Berry é relevante para a compreensão de temas tão diversos quanto os efeitos Hall quânticos, teorias topológicas de bandas e para a proposta de computação quântica holonômica.Entretanto, a complexidade das ferramentas matemáticas necessárias para uma compreensão profunda das fases geométricas faz com que muitos pesquisadores focados nas aplicações incorporem essas grandezas em seus cálculos via procedimentos ad hoc, sem realmente entenderem as diferenças entre os diferentes casos. De fato, pouco após a introdução do conceito por M. Berry, Barry Simon percebeu que, genericamente, uma fase geométrica pode ser interpretada como uma holonomia de um fibrado em uma variedade e que o potencial de calibre pertinente pode ser visto como uma conexão nesse fibrado.Nesse trabalho buscou-se apresentar o efeito Aharonov-Bohm em sua formulação matemática adequada, por meio da realização da fase geométrica como uma holonomia não trivial, bem como um entendimento mais profundo acerca da origem e significado físico de tal efeito, de caráter exclusivamente quântico. Para tanto, a conexão entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Clássica foi estudada, por meio da formulação bohmiana e da abordagem quasi-newtoniana da mecânica quântica. (3)

Palavras-chave: Efeito Aharonov-Bohm. Fase geométrica. Fase de Berry. Potencial quântico.Formulação bohmiana.

Referências:

1 AHARONOV, Y; BOHM, D.Significance of electromagnetic potentials in quantum theory. **Physical Review**. v.115, n.3, p. 485–491,1959.

2 PESHKIN, M; TONOMURA, A. **The Aharonov-Bohm effect**. New York:Springer-Verlag, 1989.

3 ATIQ, M.; KARAMIAN, M.;GOLSHANI, M. A quasi-Newtonian approach Bohnian mechanis l: quantum potential. **Annales de La Fondation Louis de Broglie,** v.34, n.1, 2009.

PG78

Estudo da dinâmica de interação de diferentes tipos de curcumina em culturas planctônicas de bactérias.

PINTO JUNIOR, F. F. [1]; GUIMARÃES, F. E. G. [1]

fabiojr@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

As fascinantes propriedades curativas da luz despertam a curiosidade da humanidade há milhares de anos. Quando os pesquisadores Oscar Raab e seu professor Herman Von Tappeiner observaram e descreveram pela primeira vez que a ação de agentes químicos fotossensibilizadores, FS, poderiam causar a morte de células isso marcou o início de uma nova era, mas que ainda ficaria dormente por algumas décadas. Passado esse período, Lipson e sua equipe reacenderam de vez por todas a chama da Terapia Fotodinâmica quando na utilização de agentes FS para identificação de um câncer maligno obtiveram o inesperado sucesso da morte de várias dessas células. (1-2) Também usado para o combate aos microrganismos e chamada de Inativação Fotodinâmica, IF, o uso dos agentes FS tem se tornado uma alternativa cada vez mais robusta e proeminente, devido ao fato do surgimento das superbactérias pelo uso descontrolado de antibióticos. Sendo ela, a IF, uma alternativa eficaz e de relativo baixo custo para o controle desses microrganismos, todos os estudos para a sua popularização e disseminação são muito bem-vindos pela comunidade científica preocupada com a erradicação ou, ao menos, o controle desses microrganismos. Assim, a boa compreensão da interação entre o FS e os respectivo microrganismo se faz necessária para que o sucesso da IF aconteça de maneira eficaz, segura e satisfatória. (3) Desta forma, este presente estudo buscou o entendimento da interação de três diferentes Curcuminas como agentes FS em três diferentes culturas planctônicas de bactérias, sendo uma gram-negativa, a *Escherichia coli,* e outras duas gram-positivas, a *Staphylococcus aureus* e a *Streptococcus mutans.* Para isso, fez-se diferentes tipos de medidas de absorbância entre as Curcuminas, as bactérias e todas as possíveis interações entre as três Curcuminas e as três bactérias. Concluindo que as interações entre essas Curcuminas e as bactérias se dá de forma diferente para a *E. coli* e as outras duas, além de uma maior interação entre a Curcumina que contém curcuminóides do que as outras duas.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. Curcumina. Escherichia coli. Staphylococcus aureus. Streptococcus mutans.

Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Terapia fotodinâmica dermatológica**: programa TFD Brasil. São Carlos: Compacta Gráfica e Editora, 2015. 313 p.

2 WILSON, B.C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. R61-R109, 2004.

3 BAGNATO, V. S.; INADA, N. M; BLANCO, K. C. **Controle microbiológico com ação fotodinâmica**. São Carlos: Compacta Gráfica e Editora, 2017. 286 p.

PG79

Implementação de feixes de Bessel para guiamento de átomos frios entre câmaras de vácuo com armadilhas magneto-ópticas

RIVERO, D. [1]; ANGELIS, V. [2]; COURTEILLE, P. W. [1]

dalilarr@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Inola de Engenharia de São Carlos - USP

O projeto de pesquisa insere-se na construção de um gravímetro de interferometria atômico de alta precisão. (1) A primeira etapa do experimento consiste na montagem experimental para a obtenção da nuvem de átomos frios, onde átomos de Sr são evaporados, desacelerados e confinados numa armadilha magneto óptica de duas dimensões (MOT-2D : Magneto Optical Trap) e de lá são jogados para uma segunda armadilha que chamamos de MOT-3D com a ajuda de um feixe nomeado de pushing beam. A transferência dos átomos entre as duas cavidades apresenta algumas dificuldades experimentais, como a pequena abertura entre elas e o ângulo de inclinação que as separa, este último se traduz num grande problema no momento de alinhar o MOT-2D com o pushing beam e que simultaneamente os átomos possam ser pegos na segunda cavidade pela armadilha 3D.Visando uma maneira de superar este inconveniente, e como parte de um projeto em conjunto entre a EESC e o IFSC, estamos implementando a construção de um Feixe de Bessel sintonizado para o lado azul (2) de uma transição atômica que vai ter duas utilidades principais, guiar os átomos através do pequeno espaço entre as cavidades e depositá-los na zona da armadilha 3D, assim como também vai evitar que os átomos grudem nas paredes do túnel sendo guiados pela força repulsiva do potencial criado pela luz do feixe.O feixe Quase-Bessel oco (3) foi escolhido por suas vantagens experimentais, entre elas e a principal está a capacidade de formar uma zona não difrativa, ou seja, um potencial constante ao longo de uma distância específica; outra importante propriedade é a reconstrução do feixe depois de encontrar obstruções o que facilitará muito a calibração do mesmo no momento da implementação sem prejudicar ou diminuir a contagem de átomos presentes nas cavidades.

Palavras-chave: Átomos frios. Strontium. Quase bessel beam. Gravímetro.

Referências:

1 SAMOYLOVA, M. et al. Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity. **Optics Express**, v. 23, n. 11, p. 14823-14835, 2015.

2 SONG, Y.; MILAM, D.; HILL, W. T. Long, narrow all-light atom guide. **Optics Letters**, v. 24, n. 24, p. 1805-1807, 1999.

3 DUOCASTELLA, M; ARNOLD, C. B. Bessel and annular beams for materials processing. **Laser and Photonics Reviews**, v. 6, n. 5, p. 607-621, 2012.

PG80

Study on the effect of photodinamic inactivation on Escherichia coli membrane mimetics

JOCHELAVICIUS, K. [1]; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. [1]

karen.jochelavicius@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Bacterial infections are among the main causes of death in hospitals. At the same time, the unconscious use of antibiotics has favored the emergence of resistance and created super-resistant bacteria. In this scenario, scientists seek for alternative treatments to infections. One option is the antimicrobial photodynamic inactivation (PDI), which relies on the ability of a photosensitizer (PS) to absorb light at a specific wavelength, and transfer the energy to a molecular oxygen, generating reactive oxygen species (ROS). Those species may initiate oxidative reactions in its surroundings and cause cell death. (1) Even though there is evidence on the efficiency of PDI, there is little information about its molecular targets. (2) The targets will depend on the photoantimicrobial used, but the importance of the membrane is certain. It is the first barrier, after the cell wall, to be penetrated, and the first site where oxidation might take place, due to the presence of unsaturated lipids. (3) This work intend to assess the action of two PSs in *Escherichia coli* membrane mimetic, using the Langmuir monolayers. Previous results showed that curcumin and methylene blue are incorporated to the monolayer containing *E. coli* lipid extract. In addition, the presence of curcumin improves layer stability under irradiation, suggesting the formation of lipid hydroperoxides. A Langmuir-Blodgett film was built for visualization in a confocal microscope, confirming that curcumin was incorporated. Furthermore, the fluorescence emission intensity increases after photobleaching, which corroborates the hypothesis that hydroperoxides were forming. Monolayers of isolated synthetic lipids DOPE, POPG and cardiolipin also incorporated curcumin, but did not incorporate methylene blue. Irradiation, however, did not produce effects on the films. Now, we returned to the analysis with the lipid extract (a new sample, from the same supplier and from the same strain) to confirm earlier results, and proceed using methylene blue. However, slight differences in the extract composition might change the outcomes. From initial measurements, only curcumin incorporated to the film and no irradiation effect was observed. This differs from the previous observations, but resembles the findings with the isolated lipids.

Palavras-chave: Photodynamic inactivation. Bacterial membranes. Langmuir and Langmuir-Blodgett films.

Referências:

1 WAINWRIGHT, M. et al. Photoantimicrobials: are we afraid of the light? **Lancet Infectious Diseases**, v. 17, n. 2, p. e49-e55, 2017.

2 AWAD, M. M. et al.Important cellular targets for antimicrobial photodynamic therapy. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 100, n. 17, p. 7679-7688, 2016.

3 BACELLAR, I. O. L. et al. Photodynamic efficiency: from molecular photochemistry to cell death. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 16, n. 9, p. 20523–20559, 2015.

PG81

πFlowMR: um protótipo dataflow escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo

SILVA JUNIOR, J. T. [1]; MATIAS, P. [2]; RUGGIERO, C. A. [1]

jtsjunior@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Computação - UFSCar

Desde os anos 60, existe uma grande discussão acerca do ganho em desempenho computacional. Ainda nesta época, essa discussão já pairava sobre duas principais vertentes. De um lado, acreditava-se que seria possível o aumento indefinido na frequência do clock dos processadores, de forma que as operações dos programas seriam executados a uma taxa de frequência mais alta e isso garantiria ganho em desempenho computacional, conforme previsto pela Lei de Moore. O outro lado da discussão argumentava que haveria limitações físicas para o aumento da frequência de clock, e que para obter ganhos significativos em desempenho, seria necessária a realização de operações concorrentes onde fosse possível. Pôde-se verificar nas últimas décadas que realmente existem limitações físicas que não permitem o aumento indefinido da frequência de clock (1), como o princípio da incerteza, ou a dissipação da potência em calor, por exemplo. Dessa forma, a outra vertente da discussão ganhou grande notoriedade e atualmente, o ganho em desempenho computacional é obtido principalmente a partir da execução concorrente de operações. A fim de reduzir a dependência do programador em extrair as capacidades de paralelismo do processador, diversos paradigmas de computação paralelas foram exploradas ao longo deste período. Dentre estas abordagens, uma que se destaca por sua simplicidade e capacidade de exploração de paralelismo, é o paradigma da computação dirigida por dados. Neste paradigma, as instruções presentes no programa que se deseja executar são ativadas a partir da disponibilidade dos dados necessários para sua execução. Com isso, o paralelismo passa a se tornar intrínseco à arquitetura e não mais dependente da estrutura do programa que se deseja computar. Uma implementação desse paradigma que se destacou em sua época foi a Máquina Dataflow de Manchester (MDFM), um poderoso processador baseado no modelo dinâmico de fluxo de dados, e que foi tomado como a base do presente projeto. (2) Uma das principais características da MDFM é a fina granularidade de seu conjunto de instruções. Esta característica permite a exploração de uma quantidade significativa de paralelismo. Entretanto, a estrutura da arquitetura necessita de uma grande quantidade de recursos para lidar com tamanho paralelismo. Dessa forma, este projeto busca distribuir as ações dos programas entre múltiplas instâncias da MDFM, garantindo um sensível aumento em sua granularidade, no conceito conhecido como Multianel. (3) Nesta nova abordagem, cada anel que irá compôr a estrutura da máquina ficará alocada em uma placa de FPGA. Com isso, é esperada a descentralização da execução dos programas, a fim de evitar sobrecarga de instruções nos recursos de cada anel. Além disso, a partir dessa nova abordagem, pretende-se aumentar a quantidade de unidades de processamento tanto quanto necessário, em um sistema paralelo. Nesta estratégia, foi possível verificar resultados bastante apreciáveis em comparação com modelos que utilizavam estruturas semelhantes para a exploração de paralelismo em fluxo de dados, mas que não possuíam o caráter escalável explorado por este projeto.

Palavras-chave: Fluxo de dados. FPGA. Escalabilidade.

Referências:

1 MARKOV, I. Limits on fundamental limits to computation. **Nature**, v. 512, n. 7513, p. 147-154, Aug. 2014

2 GURD, J. R. The Manchester dataflow machine.**Computer Physics Communications**, v. 37, n. 1-3, p. 49-62, July 1985.

3 BARAHONA, P. M. C. C.; GURD, J. R. Processor allocation in a multi-ring dataflowmachine. **Journal of Parallel and Distributed Computing,** v. 3, n. 3, p. 305-327, Sept. 1986.

PG82

Modelo estatístico para desenvolvimento de chuveiros atmosféricos

BOTELHO JUNIOR, M. V. [1]; SOUZA, V. [1]

moacyr.botelho@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Raios cósmicos são partículas carregadas que vem de fontes extraterrestres, as quais ainda não são conhecidas exatamente. Seu fluxo é descrito por uma lei de potência da energia e seu espectro de energia varia desde alguns GeV até eventos super energéticos de 10^{20}1020 eV. (1) Quando um raio cósmico adentra na atmosfera da Terra, ele colide com o núcleo dos elementos ali presentes (Nitrogênio e Oxigênio, por exemplo), dando origem a uma cascata de partículas. Esta, também chamada de chuveiro atmosférico extenso, é importante para experimentos de astrofísica, uma vez que os eventos de altíssima energia são extremamente raros e de difícil detecção direta. Com os chuveiros, é possível detectar as partículas secundárias, geradas nas colisões, em observatórios no solo, como o Pierre Auger. (2) Detectando essas partículas secundárias, tais como múons e elétrons, é possível fazer uma reconstrução do chuveiro, com a finalidade de descobrir qual a composição dos raios cósmicos incidentes e qual a energia desses primários, por exemplo. O projeto propõe a construção de um modelo semi-analítico que descreva esse fenômeno, fornecendo equações para grandezas observáveis, tais como número de múons e profundidade longitudinal máxima alcançada pelo chuveiro. Essas cascatas também podem ser simuladas computacionalmente, obtendo resultados bastante detalhados. Porém, essas simulações tem um alto custo computacional, uma vez que o processo envolvido nas colisões é estocástico e possui um grande número de partículas. Por outro lado, os modelos analíticos simplificados buscam descrever o desenvolvimento de chuveiros atmoféricos qualitativamente, explorando a física contida nesse fenômeno. O modelo de Heitler-Mathews (3) fornece equações para o número médio de partículas em uma camada do chuveiro e para profundidade máxima alcançada, por exemplo. No entanto, esse modelo não explora a estocasticidade ali envolvida. Os processos de ramificação são uma possível maneira de tentar descrever o desenvolvimento das castatas de partículas na atmosfera. Com o método da função geradora, é possível encontrar uma função semi-analítica que forneça média e variância do número de partículas em determinada camada do chuveiro. Um dos objetivos desse modelo proposto no projeto é explorar a importância de cada parâmetro da teoria, observando suas implicações no resultado final e comparando-o com os das simulações de Monte Carlo.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Chuveiros atmosféricos. Processos de ramificação.

Referências:

1 ENGEL, R.; HECK, D.; PIEROG, T. Extensive air showers and hadronic interactions at high energy. **Annual review of nuclear and particle science**, v. 61, p. 467-489, Nov 2011. doi:10.1146/annurev.nucl.012809.104544.

2 PIERRE AUGER COLLABORATION. The Pierre Auger cosmic ray observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**: accelerators, spectrometers, detectors and associated equipment, v. 798, p. 172-213, Oct. 2015. doi: 10.1016/j.nima.2015.06.058.

3 MATTHEWS, J. A Heitler model of extensive air showers. **Astroparticle Physics**. v. 22, n. 5/6, p.

387-397, Jan. 2005.

PG83
Ghost propagator and geometry in lattice Gauge theories

LACHINI, N. P. [1]; MENdeS, T. [1]; CUCCHIERI, A. [1]

nelsonlachini@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The Standard Model is, up to this date, the more complete description of fundamental interactions in physics. As a part of that model, quantum chromodynamics (QCD) is the theory which describes the strong force, presenting non-trivial aspects due to its non-Abelian structure. Within the framework of QCD, quarks are the massive particles and gluons are the massless mediators. Analytical computations are possible at high energy scales (bigger than 1GeV), where quarks are almost free and perturbation theory yields good predictions. However, the low energy sector of QCD, where we find most part of the matter around us (like protons and neutrons), is still an unknown land. For example, the confinement of quarks is experimentally observed and yet its rigorous derivation from QCD has failed until now. The lattice regularization of field theories allows us a non-perturbative study of QCD through first principles implementing statistical mechanics methods, say, Monte Carlo, in computer programs. In particular, lattice computations are suitable to study aspects of color confinement in the Gribov-Zwanziger approach. (1) In that scenario, the infrared behavior of the gluon and ghost propagators play a fundamental role in the confinement mechanism. In this work, a lattice version of the study (2) is made, analyzing different SU(2) field configurations in Landau gauge. More specifically, along the lines of (3), the geometry of these solutions in gauge-configuration space is investigated by numerical methods. One of the configurations implemented, the instanton, is a classical solution of the field equations with non-trivial topology which is believed to be related to confinement, not to mention its importance explaining the mass of the η' meson and understanding the structure of the QCD vacuum.

Palavras-chave: Lattice. Confinement. Gribov-Zwanziger.

Referências:

1 VANDERSICKEL, N.; ZWANZIGER, D. The Gribov problem and QCD dynamics. **Physics Reports**, v. 520, n. 4, p. 175-251, 2012.

2 MAAS, A. On the spectrum of the Faddeev-Popov operator in topological background fields. **European Physical Journal C**, v. 48, n. 1, p. 179-192, 2006.

3 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Ghost sector and geometry in minimal Landau gauge: further constraining the infinite-volume limit. **Physical Review D**, v. 88, n. 11, p. 114501-1-114501-22, 2013.

PG84
Astroparticles as a probe for Lorentz invariance violation

LANG,R. G.[1]; MARTINEZ-HUERTA,H. [1]; SOUZA. V. de [1]

rodrigo.lang@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, the potential of studying Lorentz invariance violation (LIV) with astrophysics is discussed. Lorentz invariance is one of the pillars of relativity and its violation has been proposed by several high-energy theories (1). A phenomenological approach that reduces LIV effects to a change in the dispersion relation is presented. The effects on the pair production of propagating energetic photons due to sub-luminal LIV in the photon sector is obtained. The main result is a shift in the phase space, leading to a higher mean free path. The possibility of testing LIV in three different scenarios with this approach is treated. The effect on the flux of GZK photons is obtained by performing the full simulation and considering the whole background spectrum for the first time in the literature. The influence of the models for the composition, injected spectra and evolution of the sources of ultra-high energy cosmic rays (UHECRs) is also discussed for the first time in the literature. Upper limits on the flux of photons from the Pierre Auger Observatory (2) are used to impose competitive limits on the LIV coefficients. These limits are more conservative and up to date than previous ones. The potential of testing LIV with the Cherenkov Telescope Array (CTA) (3) is also estimated. A capability of detecting LIV of the order of 10^{28} eV with at least 51σ is obtained. The possibility of improving current limits by a factor of 2-5 is also discussed. This proves that the next generation of IACTs will play an important role in the studies of LIV. An innovative analysis for searching LIV signatures using multiple TeV sources is also presented. This analysis reduces biases and increases statistics when compared to previous ones. A method for choosing which present and future measurements can contribute significantly for LIV studies is also proposed. Limits at least 3.3 times better than the best ones in the literature so far are imposed using this analysis for current TeV data. These limits also contain less biases.

Palavras-chave: Lorentz invariance violation. Gamma-ray. Ultra-high energy cosmic rays. Multi-messenger.

Referências:

1 MATTINGLY, D. Modern tests of Lorentz invariance. **Living Review in Relativity**, v. 8, p. 1-78, 2005./hrefhttps://arxiv.org/ct?url=http%3A%2F%2Fdx.doi.org%2F10%252E12942%2Flrr-2005-5&v=e7a570eddoi:10.12942/lrr-2005-5.

2 THE PIERRE AUGER COLLABORATION. The Pierre Auger Cosmic Ray Observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A,**v. 798, p. 172-213,2015/hrefhttps://arxiv.org/ct?url=http%3A%2F%2Fdx.doi.org%2F10%252E1016%2Fj%252Enima%252E20

3 THE CTA CONSORTIUM. Introducing the CTA concept. **Astroparticle Physics**, v. 43, p. 3-18, 2013.doi: 10.1016/j.astropartphys.2013.01.007.

PG85

Análise das correlações quânticas do jogo da Batalha dos Sexos

LEAL, A. C. S. [1]

adrianeleal@ifsc.usp.br

BONAGAMBA, T. J. [1]
ARAÚJO FERREIRA, A. G. [1]
OLIVEIRA, E. L. [1]
AUCCAISE, R. [2]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Universidade Estadual de Ponta Grossa - UEPG

A Teoria de Jogos têm fascinado os matemáticos por muito tempo e têm sido usados para estudar uma variedade de tópicos, desde a evolução do comportamento animal até a possibilidade de conflitos entre países. Recentemente, este campo da Teoria de Jogos está tomando uma direção completamente nova, liderada por físicos interessados na Mecânica Quântica. Esta ligação entre a Mecânica Quântica e Teoria de Jogos deu origem a área da Teoria de Jogos Quânticos. Nas versões quânticas de jogos existentes, os jogadores podem manipular suas estratégias (vetores de estado quânticos) através de operadores de estratégias quânticas. Além disso, o princípio de superposição de estratégias e o conceito de emanharamento podem ser explorados, permitindo que os *payoffs* (ganhos) dos jogadores sejam melhorados. Nesse sentido, alguns pesquisadores afirmam que esta possibilidade de manipulação faz desaparecer alguns dilemas existentes em jogos clássicos. Dentro do âmbito dessa discussão, estudamos o jogo da Batalha dos Sexos na versão quântica, para dois jogadores, denominados Alice e Bob. Por meio desse estudo, uma análise teórica foi fundamentada e nos embasamos no protocolo de Eisert et al. (1) para aplicar propriedades advindas de emaranhamento de estratégias. Esta análise também permitiu demonstrarmos que o emaranhamento otimizou os equilíbrios do jogo. Desta forma, para o caso em que os jogadores escolhem entre dois perfis de operadores de estratégias quânticas, o dilema pode ser resolvido. Ainda com base nos resultados teóricos, uma proposta de implementação experimental do jogo na condição de máximo emaranhamento foi sugerida via a técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Além disso, com o intuito de fundamentar nossas análises por meio desta técnica, quantificamos o grau de correlações quânticas das estratégias dos jogadores por meio do conceito de Discórdia Quântica.(2-3)

Palavras-chave: Teoria de jogos quânticos. Teoria de informação quântica. Ressonância magnética nuclear.

Referências:

(1) EISERT, J.; WILKENS,M.; LEWENSTEIN, M. Quantum games and quantum strategies. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 15, p. 3077, 1999.

(2) OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Review Letters**, v. 88, n. 1, p. 017901, 2001.

(3) HENDERSON, L.; VEDRAL, V. Classical, quantum and total correlations. **Journal of Physics A**, v. 34, n. 35, p. 6899, 2001.

PG86

Enzimas lipolíticas de Bacillus licheniformis: caracterização bioquímica, biofísica e estrutural

LEITE, A. E. T. [1]; KAdoWAKI, M. A. S.[1]; POLIKARPOV, I.[1]

anatognoli@hotmail.com

[1]Instituto de física de São Carlos - USP

Lipases bacterianas começaram a ser estudadas após a descoberta do microbiologista C. Eijkmann de que bactérias eram capazes de produzirem e secretarem esse tipo de proteína (1). Essas enzimas são capazes de realizar a hidrólise de triacilgliceróis além de apresentarem atividade em diferentes solventes orgânicos. Com o desenvolvimento da tecnologia enzimática, as lipases começaram a receber considerável atenção pelas diversas aplicações biotecnológicas como em aditivos para detergentes, biossurfactantes e ainda nas indústrias de papel e alimento (2-3).Neste trabalho foram realizadas a expressão heteróloga e purificação de uma enzima lipolítica de *Bacillus licheniformis* assim como a sua caracterização bioquímica, cristalização e possível aplicação como bioemulsificante.A expressão foi realizada em meio LB e a purificação realizada por meio de técnicas cromatográficas de afinidade e gel filtração. Através da caracterização bioquímica foi determinada a temperatura ótima de 30°C e o pH ideal 9,0. Dentre os substratos sintéticos testados, a enzima mostrou melhor atividade em *p*NP-Octanoato. Através da técnica de *ThermoFlour* e análise de estabilidade térmica foi possível detectar uma maior estabilidade na presença de NaCl fornecendo base para estudos dessas enzimas no processo de "*oil recovery*". Nos testes de índice de emulsificação E24, realizado em três diferentes substratos (querosene, óleo de girassol e azeite de oliva), foi observado que para todos os substratos essa enzima apresentou a taxa de emulsificação mínima necessária para ser utilizada como bioemulsificante (50%), tendo uma melhor atuação no azeite de oliva onde atingiu mais de 80% de emulsificação. Para melhor compreender a relação entre estrutura e propriedades bioquímicas, esta enzima foi submetida a ensaios de cristalização. Cristais da enzima foram obtidos na condição contendo 20% PEG 3000 e 0.1M de Tris pH 8,5 e submetida a difração de raios-X. O cristal obtido difratou a uma resolução de 2,3 Å e os dados estão em etapa de análise.Através desses resultados poderemos entender melhor as características dessa enzima e descobrir a partir disso possíveis aplicações em industrias de papel e alimentos ou áreas biotecnológicas, como por exemplo em processos de "oil recovery".

Palavras-chave: Bacillus licheniformis. Lipase. Caracterização bioquímica. Cristalografia.

Referências:

1 JAEGER, K.E.; EGGERT, T. Lipases for biotechnology. **Current Opinion in Biotechnology** v.13, n. 4, p.390-397,2002.

2 NTHANGENI, M. B. et al.Over-expression and properties of a purified recombinant Bacillus licheniformis lipase: a comparative report on Bacillus lipases. **Enzyme and Microbial Technology, v.** 28, n.7–8, p.705-712, 2001.

3 SHARMA,R. et al. Purification and characterisation of a thermostable alkaline lipase from a new thermophilic *Bacillus* sp. RSJ-1.**Process Biochemistry,** v. 37, n.10, p.1075-1084,2002.

PG87

Silica-based nanostructures carrying PpIX for cancer treatment

LEITE, I. S. [1]; VIVERO-ESCOTO, J. L. [2]; LYLES, Z. [2]; INAda, N. M. [1]

ilaiali.leite@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Department of Chemistry - UNC Charlotte

According to the World Health Organization, cancer is among the leading causes of mortality worldwide, with 8.2 million cancer-related deaths reported in 2012. Over the following 20 years this number is expected to rise by 70 %. (1) Photodynamic therapy (PDT) is a technique originally developed for cancer treatment, but currently it is also used to treat infections and other diseases. (2) Its cytotoxicity is based on the oxidation of cellular components by reactive oxygen species produced when light-sensitive molecules (photosensitizers) are activated by light in an oxygen-rich environment. PDT efficiency depends on the photosensitizer buildup at the treatment site, and the challenge of delivering the active substance also constitutes a fundamental problem in drug development. Nanotechnology has been employed since the 1960's to optimize drug delivery through the use of different systems. The combination of PDT's oxidative damage to induce cell death with nanotechnology's targeting ability and the enhanced permeation through cell membrane is a promising approach to optimize cancer treatment. In this work, we aim to verify and compare the efficiency of four polysilsesquioxane-PpIX nanoparticles: one composed of silica and PpIX (Ctrl-PpIX-SiNps), a nanoparticle similar to the previous system containing a redox-responsive linker that can be broken under reducing environments usually found in cancer cells (RR-PpIX-SiNps), a RR-PpIX-SiNps functionalized with polyethylene glycol (PEG, PEG-RR-PpIX-SiNps) and PEG-RR-PpIX functionalized with folic acid (FA-PEG-RR-PpIX-SiNps), to improve the nanoparticle's targeting property for *in vivo* applications. Nanoparticle uptake was assessed by flow cytometry and confocal microscopy and revealed that, after 24 hours of incubation, a significant amount of PpIX was present inside the cells and with higher selectivity to tumor cells. Cytotoxicity was evaluated in healthy (human fibroblasts – HDFn cell line - and keratinocytes - HaCaT) and tumor cells (MCF-7 – human mammary carcinoma, B16-F10 – murine skin melanoma and A431 – human skin non-melanoma). Dose-response experiments revealed the higher susceptibility of B16-F10 cells to PDT (630 nm, 50 J/cm^2) when compared to fibroblasts: when incubated for 24 h with 50 μg/mL of nanoparticles, the viability of B16-F10 cells after PDT was reduced to approximately 20 %, while similar results were obtained in HDFn cultures when concentrations over 150 μg/mL were used. The comparison of PDT effectiveness between nanostructured PpIX and free PpIX revealed that, when exposed to RR-PpIX-SiNPs, MCF-7 and A431 cells were more prone to PDT cytotoxic effects (70 % of cell death) than the HaCaT cell line (less than 30 % of cell death). Free PpIX, however, displayed high dark and phototoxicity for MCF-7, A431 and HaCaT cells, inducing more than 90 % of cellular death in both cell lines. Reactive oxygen species production upon sample irradiation was also evaluated using the cell-permeant 2',7'-dichlorodihydrofluorescein diacetate (H2DCFDA) probe. A significant fluorescence intensity increase was verified after cells were submitted to light exposure, suggesting cell death was promoted by PDT via ROS generation inside the cells. Further assays will evaluate the mitochondrial membrane potential before and after treatment, apoptosis/necrosis rates and *in vivo* analysis such as nanoparticles distribution and PDT's efficacy.

Palavras-chave: Photodynamic therapy. Nanotechnology. Cancer. Protoporphyrin IX.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. Cancer. **Fact sheet**, 1 Feb. 2018. Available from: <http://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer>. Accessible at: 10 Sept. 2018.

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

PG88
Control of non-Markovianity by the dissipation of a qbit

LIMA, R. B. B. [1]; SOARES-PINTO, D. O. [1]; de BRITO, F. B. [1]; de AZEVEDo, E. R. [1] FILGUEIRAS, J. G. [1]

rafael.tahzib@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Unlike closed quantum systems where we use unit operators to describe e dynamics of some state, in general for open quantum systems it becomes necessary to use the formulation of quantum master equations to completely describe the dynamics of the system. (1) Furthermore, to describe real quantum systems we have to consider the unwanted interactions with the surrounding environment. This interaction between the quantum systems and the environment is the central topic of study in the theory of open quantum systems. (1-2) Moreover, these unwanted interactions imply in the appearance of noise and consequently results in the loss of the quantum characteristics of the system caused by decoherence. Therefore, the decoherence is the main issue to realized quantum information processing and it is possible to link with the Markovian dynamics. Thus, the non-Markovian nature of quantum systems recently turned to be a key subject for investigations on open quantum system dynamics. (1-2) In this work, we study how to generate a Markovian to a non-Markovianity transition in a two-level system through the control of the spin-lattice relaxation rate of an ancillary qubit, which acts as the environment, where to simulate the decoherence in the system, we used two quantum channels. Furthermore, we discuss the non-Markovian aspects of such open system when the relaxation mechanism is dynamically modified by the action of an external magnetic field. Finally, we give an experimental demonstration of this toy model using liquid state nuclear magnetic resonance. (3)

Palavras-chave: Open quantum systems. Non-Markovianity. Quantum information.

Referências:

1 BREUER, H. P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. New York: Oxford University Press, 2002.

2 RIVAS, A.; HUELGA, S. F. **Open quantum systems**: an introduction. Heildelberg: Springer, 2012. (Springer briefs in physics).

3 KONDO, Y. et al. Using the quantum Zeno effect for suppression of decoherence. **New Journal of Physics**, v. 18, p. 013033-1-013033-11, Jan. 2016. doi: 10.1088/1367-2630/18/1/013033.

PG89

Estudo funcional e estrutural das proteínas spliceosomais U5-15K e U5-102K de Trypanosoma brucei

LIMA, A. L. de [1]; SILVA, N. T. A. da[1]; THIEMANN, O. H.[1]

laura.ana.lima@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A maioria dos genes dos eucariotos contém éxons e íntros em sua estrutura. Esses íntros devem ser removidos para formar o mRNA maduro, esse processo é chamado splicing e pode ocorrer de duas formas. Tanto o cis quanto o trans splicing ocorrem por meio de duas reações de transesterificação catalisadas pelo spliceossomo, um complexo formado por cinco ribonucleoproteínas snRNPs U1, U2, U4/U6 e U5. Foi visto que a U5102K forma um subcomplexo com a U515K e é importante para a formação de um complexo chamado U4/U6.U5 trisnRNP (1) e o estudo desse complexo em levedura mostrou que a Dib1(U515K) tem uma localização central no U4/U6.U5 trisnRNP, associando-se ao U5 snRNA, ao pré mRNA, à proteína Prp31 e ao domínio N terminal da Prp8. Também foi visto que tanto Dib1 quanto Prp8 estão associadas com a estabilização do hairpin formado pela parte invariante do U6 snRNA (2) e estudos recentes sugerem que a Dib1 bloqueia a formação de interações RNA-RNA e proíbe a interação dos componentes do NTC e os movimentos das proteínas para a formação do complexo B ativado. (3) Esse trabalho tem por objetivo o estudo do trans splicing em T. brucei, mais especificamente, o estudo estrutural e funcional das proteínas específicas da partícula U5 snRNP, U515K e U5102K. Para o estudo estrutural da U515K, foram feitas mutações sitio dirigidas em sua alça flexível (U515K truncada). Para o estudo dos efeitos da autoclivagem, foram realizadas mutações em regiões específicas da proteína, as mutantes foram denominadas U515KC66A, U515KS109A, U515KS126A, U515KS133 e U515Kpc. Também foi feita a clonagem da U5102K em pc_PTP_neo e clonagem de uma porção do N terminal da U5102K em pET SUMO para o estudo do subcomplexo formado por essas proteínas. As proteínas U515KC66A, U515KS109A, U515KS126A, U515KS133 e U515Kpc foram expressas em Bl21 (DE3), foi feita a purificação por afinidade e seus enovelamentos foram avaliados por Fluorimetria Diferencial de Varredura. Os testes de clivagem com as mutantes U515kC66A, U515KS109A, U515KS126A e U515KS133 mostraram que a proteína continua sofrendo autoclivagem, o que sugere que esses resíduos não fazem parte do sítio catalítico da reação. A U515K truncada foi expressa em Bl21 (DE3), foi feita a purificação por afinidade e a avaliação do enovelamento por Dicroísmo Circular e Fluorimetria Diferencial de Varredura e ensaios de cristalização, que não resultaram em cristais, novos ensaios variando a concentração de proteína e kits comerciais ainda serão realizados. Quanto ao estudo do subcomplexo 15K-102K, o N terminal da U5102K foi expresso em BL21 (DE3) e foi feita a purificação por afinidade, ainda devem ser feitos testes para avaliar seu enovelamento, estabilidade térmica e estado oligomérico e estudo da sua interação com a proteína U515K. Já a purificação dos parceiros de interação da U5102K pela técnica de PTPtag não mostrou novas proteínas. Por fim, o teste preliminar de clivagem da variante U515Kpc se mostrarou promissor na inibição da autoclivagem, mas novos testes ainda devem ser realizados antes de avaliar seu efeito em T. brucei.

Palavras-chave: Splicing. prp6. dib1.

Referências:

1 DA SILVA, M. T. A. et al. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins.

Memórias do Instituto Oswaldo Cruz, v.106, n. 2, p. 130-138, 2011.

2 BERTRAM, K. Cryo-EM structure of a human spliceosome activated for step 2 of splicing. **Nature,** v. 542, n. 7641,p. 318-323, 2017.

3 SCHREIB, C. C. et al. Functional and biochemical characterization of Dib1's role in pre-messenger RNA splicing. **Journal of Molecular Biology,** v. 430, n. 11, p. 1640-1651, 2018.

PG90

Soluções exatas do tipo Skyrmions auto-duais a partir dos ansatz conforme e mapa racional

FERREIRA, L. A. [1]; LIVRAMENTO, L. R. [1]

leandrorozalivramento@hotmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O modelo de Skyrme é um modelo efetivo não linear 3+1 dimensional para o tripleto de píons no regime de baixas energias. Este é definido em termos do campo de Skyrme $U(t, \mathbf{x}) \in SU(2)(2)$ e possui apenas um termo quadrático e um termo quártico nos campos, contudo não possui setor auto-dual. Uma extensão desse modelo proposta em (1) introduz uma matriz 3×3 simétrica, real e inversível hh acoplada ao termo quadrático nos campos e sua inversa h^{-1} acoplada ao termo quártico de tal modo a simultaneamente reduzir o modelo estendido ao modelo de Skyrme padrão quando $h = \lambda I$, com $\lambda > 0$ constante, bem como permitir por construção que o modelo estendido tenha um setor auto-dual. Em modelos que tenham setor auto-dual se pode procurar soluções estáticas estáveis através das equações de auto-dualidade, que são equações de primeira ordem nos campos que implicam automaticamente nas equações de Euler-Lagrange e saturam o limite inferior da desigualdade de Bogomolny. No presente trabalho demonstramos que só há 6 as equações de auto-dualidade independentes e que a matrix h pode ser determinada inteiramente em termos dos campos de $U(\mathbf{x})$, os quais podem ser escolhidos arbitrariamente, desde que a escolha implique em hh inversível e que a carga topológica seja inteira. Parametrizando $U(\mathbf{x})$ como em (1), utilizamos o ansatz mapa racional onde $u(z) = p(z)/q(z)$, para obter soluções de carga topológica inteira qualquer, onde Q é exatamente o maior grau entre os polinômios $p(z)$p(z) e $q(z)$. Utilizamos a simetria conforme do modelo para construir um ansatz tipo toroidal como em (2), e mostramos como construir configurações de campo com esse ansatz para qualquer Q inteiro. Em ambos os casos, a energia total do sistema é diretamente proporcional a Q, entrando em desacordo com a fórmula Weizsaecker. Por fim, propomos a introdução de um termo de sexta ordem nos campos para quebrar a simetria conforme e dar tal compatibilidade.

Palavras-chave: Skyrme. Toroidal.

Referências:

1 FERREIRA, L. A. Exact self-duality in a modified Skyrme model. **Journal of High Energy Physics**, v. 2017, p. 039-1-039-12, 2017. doi: 10.1007/JHEP07(2017)039.

2 FERREIRA, L. A.; SHNIR, Y. Exact self-dual skyrmions. **Physics Letters B**, v. 772, p. 621-627, 2017. doi: 10.1016/j.physletb.2017.07.040.

PG91

Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas

LUCHESI, A. C. F. [1]

ana.luchesi@usp.br

BRUNO, O. M. [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O mapa logístico (1) consiste em uma relação de recorrência proposta pelo físico Robert May como um modelo simples para descrever um crescimento populacional. (1) $x_n = x_{n-1}R(1-x_{n-1})$xn=xn−1R(1−x n−1) (1) Esse sistema determinístico apresenta sensibilidade às condições iniciais para certos valores do parâmetro R, o que o leva a um comportamento caótico após um certo número de iterações. Devido à sua simplicidade, o mapa logístico é uma das equações mais estudadas quando se trata de sistemas complexos e teoria do caos. Uma das consequências do comportamento de sistemas caóticos é que sua previsão a longo prazo se torna impossível. No entanto, podemos questionar o quão longe podemos prever a evolução desses sistemas, dado que trabalhos recentes conseguiram mostrar que, com o uso de aprendizado de máquina, foi possível prever o futuro do sistema de Kuramoto-Sivashinsky oito vezes além do que se conseguia com outros métodos. (2) Na última década, o aprendizado de máquinas com redes neurais tem se mostrado uma das mais poderosas ferramentas para resolver problemas de extração e reconhecimento de padrões. (3) Nesse contexto, objetivo desse trabalho é usar o aprendizado de máquinas para estudar as órbitas caóticas do mapa logístico, afim de analisar o quão longe podemos prever corretamente a evolução desse sistema. Além disso, pretendemos estudar quais informações que damos de entrada para as redes neurais tem maior influência na taxa de acerto dessas.

Palavras-chave: Teoria do caos. Órbitas caóticas. Mapa logístico. Aprendizado de máquina. Redes neurais.

Referências:

1 MAY, R. M. Simple mathematical models with very complicated dynamics. **Nature**, v. 261, n. 5560, p. 459-467, 1976.doi: 10.1038/261459a0.

2 PATHAK, J. et al. Model-free prediction of large spatiotemporally chaotic systems from data: a reservoir computing approach. **Physical Review Letters**, v. 120, n. 2, p. 024102, 2018.

3 SCHMIDHUBER, J. Deep learning in neural networks: an overview. **Neural Networks**, v. 61, p. 85-117, 2015. doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003.

PG92
Metrologia: Abordagem clássica vs. quântica

MAGNO, G. F. [1]; SOARES-PINTO, D. O. [1]

gabriel.magno@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Metrologia consiste do campo que busca estimar parâmetros de interesse (temperatura, pressão, tempo ...) via análise de dados experimentais. Em problemas de estimativa de parâmetros, podemos obter informação sobre eles dada uma amostragem de dados, sua respectiva distribuição e um preciso conhecimento do fenômeno físico envolvido, portanto é necessário um modelo matemático que leve em conta esses aspectos, fazendo a tarefa de estimar objeto de estudo em física teórica. (1) Questões naturais surgem nesse contexto: quanta informação um conjunto de dados pode me fornecer sobre um parâmetro desconhecido? Existe um quantificador para informação? O quão próxima do valor real é a estimativa que resulta de um dado estimador do parâmetro? Como otimizar a estimativa? Todas essas questões recaem no estudo do Limite inferior de Cramer-Rao, resultado central em problemas de estimativa de parâmetros que, sobre certas hipóteses, estabelece uma cota mínima para a variância de um estimador não-viesado do parâmetro em questão, dada a informação sobre o mesmo quantificada pela Informação de Fisher que podemos extrair do conjunto de dados. O quão próximo a variância do meu estimador está do limite de Cramer-Rao diz respeito a qualidade da estimativa. Vamos apresentar e discutir esse resultado nos contextos clássico e quântico para estados puros e evolução unitária, comparando resultados e notando o que os efeitos quânticos, especialmente o emaranhamento, podem trazer de novo ao processo de estimativa. (2)

Palavras-chave: Metrologia. Informação de Fisher. Limite de Cramér–Rao.

Referências:

1 BASTOS, W. P. **Estudo da atingibilidade do limite de Cramér-Rao em metrologia quântica**: surgimento do limite de Heisenberg. 2016. 120p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2016.

2 GIOVANNETTI,V.; LOYD, S.; MACCONE, L. Quantum metrology. **Physical Review Letters**, v. 96, n.1, p.010401, 2006.

<h5»</h5»

PG93
Análise termodinâmica de sistemas quânticos

MALAVAZI, A. H. A. [1]; BRITO, F. [1]

andrehamalavazi@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente tem-se observado um grande esforço da comunidade científica em conectar os conhecimentos oriundos da mecânica quântica com aqueles - já há muito estabelecidos - da termodinâmica. Embora desenvolvidas em contextos e regimes distintos, o imenso sucesso de ambas as teorias suscita a procura de tais conexões: por um lado busca-se compreender a emergência do comportamento termodinâmico a partir da dinâmica quântica subjacente, por outro investiga-se a extensão da termodinâmica para sistemas quânticos fora do equilíbrio. Entretanto, apesar de avanços recentes as bases da termodinâmica quântica ainda se encontram em desenvolvimento, em particular não estão claros como traduzir efetivamente quantidades termodinâmicas fundamentais para o regime quântico, tais como trabalho e calor, e qual o papel que propriedades genuinamente quânticas podem desempenhar em processos termodinâmicos gerais, como coerência e emaranhamento. Neste contexto, tendo em vista os avanços experimentais no controle de sistemas quânticos, uma definição consistente de trabalho é de suma importância, em particular para o desenvolvimento de novas máquinas térmicas. Contudo, embora diversas propostas tenham sido apresentadas, muitas sutilezas a respeito de sua natureza têm sido identificadas. (1-2) Neste projeto faremos uso das definições de trabalho e calor propostas inicialmente por Alicki (3) para analisar a termodinâmica de processos e sistemas quânticos. Desta maneira, procuraremos identificar e avaliar o eventual papel termodinâmico que propriedades quânticas exercem na dinâmica destes processos. Ademais, investigaremos as potenciais mudanças dos teoremas de flutuação no regime quântico, em especial a Igualdade de Jarzynski.

Palavras-chave: Termodinâmica quântica. Teoremas de flutuação quânticos. Trabalho quântico.

Referências:

1 TALKNER, P.; LUTZ, E.; HÄNGGI, P. Fluctuation theorems: work is not an observable. **Physical Review E**, v. 75, n. 5, p. 050102-1-050102-2, May 2007.

2 PERARNAU-LLOBET, M. et al. No-go theorem for the characterization of work fluctuations in coherent quantum systems. **Physical Review Letters**, v. 118, n. 7, p. 070601-1-070601-6, Feb. 2017.

3 ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. **Journal of Physics A**, v. 12, n. 5, p. L103-L107, 1979.

PG94

Influência do radical na seção de choque da A2F em moléculas de Chalconas

MANOEL, D. S. [1]; RODRIGUEZ, R.D. F. [1]; LIMA, R. S. [2]; NOda-PEREZ, C.[2]; MARTINS, F. T. [2]; GONÇALVES, P. J. [3]; BONI, L. de[1]; MENdoNÇA, C. R. [1]

sm1.diego@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Intituto de Química - UFG

[3]Instituto de Física - UFG

Materiais com propriedades ópticas não lineares (ONL) são importantes para aplicações em ciência e tecnologia. Em específico, os que apresentam absorção de dois fótons (A2F) são de grande interesse para a produção de limitadores ópticos, micro fabricação 3D, terapias fotodinâmicas entre outros. Nesta linha, moléculas orgânicas, como as chalconas, são interessantes pois podem ser sintetizadas com estruturas similares, permitindo a busca por maiores seções de choque de A2F (1). Neste trabalho, estudamos a A2F em cinco moléculas da família das chalconas com diferentes radicais, sendo eles Cl, Br, CH_3, NO_2 e OCH_3, tendo como objetivo caracterizar seus espectros não lineares e estudar como cada radical influencia a A2F. Para determinar a A2F utilizamos a técnica de varredura Z absortiva (Z-Scan), com um sistema laser de Ti:Safira (CPA-2001, Clarck-MXR Inc.), centrado em 775 nm com uma taxa de repetição de 1 KHz e pulsos de 150 fs. Este laser serve como fonte de bombeio para um amplificador óptico paramétrico (Topas, Light Conversion) que produz pulsos de 120 fs em um intervalo de 470 a 1800 nm, permitindo estudos em uma ampla faixa espectral. A partir dos resultados obtidos pelas curvas de varredura-Z foi determinada a seção de choque de A2F para cada comprimento analisado, gerando o espectro não linear de cada molécula. Os espectros são ajustados através do modelo da soma de estado. Posteriormente os valores das seções de choque de A2F foram comparados e analisados em função da característica de cada radical. Todas as moléculas apresentaram A2F com valores para a seção de choque que variam entre 15 e 32 GM. Observamos que a seção de choque de 2PA aumenta para as moléculas que apresentam radicais doadores de elétrons. Estes resultados são interessantes pois nos permitem entender como cada radical impacta as propriedades ONL de uma mesma estrutura molecular. Desta forma é possível a obtenção de moléculas com maiores seções de choque de A2F. Como perspectivas futuras pretendemos estudar como a posição do radical na molécula modifica suas propriedades ONL.

Palavras-chave: Óptica não linear. Absorção de dois fótons. Z-scan. Moléculas orgânicas Chalconas.

Referências:

1 ABEGAO, L. M. G. et al. Second- and third -order nonlinear optical properties of unsubstituted and mono-substituted chalcones. **Chemical Physics Letters**, v. 648, p.91-96,2016.doi:10.1016/j.cplett.2016.02.009.

PG95

Estudo da dinâmica de partículas aprisionadas em pinças ópticas

MARTINS, T. T. [1]; MUNIZ, S. R. [1]; ONCEBAY SEGURA, C. O. [1]

thalyta.tm@hotmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Devido às inúmeras aplicações em física, biologia, química, ciências médicas e nanociência, o estudo de pinças ópticas têm atraído atenção de pesquisadores em todo o mundo (1). Este sistema consiste em uma objetiva de alta abertura numérica, responsável por focar um feixe de laser, e uma amostra de partículas dielétricas. Quando as partículas se aproximam do foco do laser, devido à transferência de momento dos fótons incidentes, surge a força de aprisionamento óptico (2). Considerando que a potência do laser utilizado é da ordem de miliwatts, a força da pinça óptica é da ordem de nanonewtons, o que possibilita a manipulação de partículas micrométricas ou menores. No presente trabalho, apresentaremos o comportamento de esferas de sílica, de diâmetro de 2 micrômetros, aprisionadas em um poço aproximadamente harmônico. Com o auxílio de uma câmera, foram obtidas as trajetórias das partículas aprisionadas e, a partir disso, calculadas as constantes de força para as coordenadas x e y. Dentre os métodos de calibração utilizados, destacamos: a análise do potencial da pinça, obtida a partir da distribuição de probabilidade de Maxwell-Boltzmann, e o cálculo da constante de força a partir do teorema de equipartição (3). Análises parciais desses resultados apresentam uma constante de força da ordem de $10^{-7}10-7$ N/m, que são consistentes com os parâmetros utilizados e a literatura.

Palavras-chave: Óptica. Pinças ópticas. Aprisionamento óptico. Dinâmica.

Referências:

GUO, H. L.; LI, Z. Y. Optical tweezers technique and its applications. **Science China Physics, Mechanics and Astronomy**, v. 56, n. 12, p. 2351-2360, 2013.
NEUMAN, K. C.; BLOCK, S. M. Optical trapping. **Review of Scientific Istruments**, v.75, n. 9, p. 2787,2004.
ULANOWSKI, Z. Optical tweezers: principles and applications. **Proceedings RMS**, v.36, n.1, p.7-14,2001. 2001.

PG96

Estudo de chuveiros hadrônicos com alta produção eletromagnética

MARTINS, E. E. P. [1]; SOUZA, V. [1]

e.emily@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os processos que ocorrem em estrelas, supernovas, núcleos de galáxias e outros objetos astrofísicos dão origem ao que conhecemos como Raios Cósmicos: partículas de altas energias, desde prótons à núcleos de Ferro, que chegam à Terra configurando um fluxo que obedece à uma lei de potência em termos da sua energia. O espectro formado abrange energias desde poucos GeV até $\sim\sim 10^{11}$ GeV (o equivalente à $\sim\sim 10^{20}10$ eV) . São gerados também fótons com altas energias, os chamados Raios Gamma. Após percorrer vastas distâncias, a chegada dos Raios Cósmicos/Gamma à atmosfera terrestre dá origem à uma sucessão de eventos no que conhecemos como Extensive Air Showers, onde novas partículas vão sendo criadas e penetram cada vez mais na atmosfera, dissipando energia e diminuindo a energia por partícula da cascata. Podemos distribuir as partículas geradas nesta cascata em três componentes de acordo com sua composição: i) componente hadrônica, ii) componente eletromagnética (elétrons, pósitrons e fótons) e iii) componente muônica. As cascatas iniciadas por hádrons culminam numa alta produção de múons devido a processos como $\pi\pm \rightarrow \mu \pm +\nu_{\mu}$, chegando a representar 10% do fluxo de partículas no solo. (1) Por outro lado, uma cascata cuja partícula primária é um fóton energético terá uma quantidade muito menor de múons. O fluxo de múons é um parâmetro importante na diferenciação, pelos experimentos, de cascatas iniciadas por hádrons daquelas iniciadas por Raios Gamma. Há uma possibilidade, entretanto, que numa cascata iniciada por hádron a produção de múons seja pequena: desde que na primeira interação a leading particle (partícula com maior fração da energia primária) seja um píon neutro. Uma vez que o principal processo de decaimento deste píon é $\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$ (2), a maior parte da energia será alocada à componente eletromagnética já na segunda interação com o decaimento em fótons altamente energéticos. Surge então uma maior dificuldade em diferenciar cascatas deste tipo daquelas iniciadas por fótons. A fim de determinar a produção de píons neutros como leading particle em cascatas iniciadas por prótons, uma série de 100 mil simulações de interação p – Nitrogênio foi realizada para energias do próton de 10 a 100 TeV (1 TeV = 10^{12} eV), em passos de 10 TeV. Observando todas as simulações, encontramos uma taxa média de produção de 3,22 % das partículas secundárias sendo $\%\pi^0\%$ como leading particle. Encontramos também que a energia média desse píon neutro é de $\sim\sim 29\%$ da energia do próton primário. Da análise desses primeiros resultados inferimos a relevância do tema proposto como objeto de mestrado, uma vez que uma fração significativa do que é a priori medido como cascata iniciada por gamma é na verdade uma cascata gamma-like : iniciada por um próton que produz um píon neutro como leading particle. O objetivo principal deste estudo em andamento será então definir um parâmetro que permita a distinção de uma cascata iniciada por gamma de uma gamma-like.

Palavras-chave: Cascatas atmosféricas. Raios cósmicos.

Referências:

1 GRIEDER, P. K. F. **Extensive air showers**: high energy phenomena and astrophysical aspects - a tutorial, reference manual and data book. New York: Springer, 2010.

2 TANABASHI, M. et al. Review of particle physics , **Physical Review D**, v. 98, n. 3, p. 030001-1-030001-1898, 2018.

PG97

Demônio de Maxwell quântico em sistemas supercondutores com ambientes térmicos controláveis

MARTINS, G. F. [1]; BRITO, F. [1]

gabriela.fernandes.martins@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

James Clerk Maxwell apresentou em 1871, pela primeira vez ao público, um experimento mental em que um "ser inteligente", com a capacidade de acompanhar a dinâmica individual de partículas microscópicas, seria capaz de gerar uma diferença de temperatura em um gás que se encontra inicialmente em um estado de equilíbrio. Contudo, isto criaria uma grave violação da 2ª Lei da Termodinâmica, já que a entropia do gás diminuiria mesmo não tendo sido realizado nenhum trabalho sobre o sistema. O paradoxo criado pela atuação deste ser, denominado Demônio de Maxwell, atormentou a comunidade científica durante quase um século. A solução revolucionária para este paradoxo foi proposta em 1961 por Rolf Landauer, posteriormente cunhada de Princípio de Landauer, e afirma que o ato de apagar a informação mantida pelo "ser"está irremediavelmente associado a um aumento de entropia, como previsto pela 2ª Lei da Termodinâmica. (1) Com a evolução da tecnologia e a miniaturização dos dispositivos que ocorreram durante as últimas décadas, tornou-se possível o estudo de sistemas nano-mesoscópicos submetidos a processos muito específicos e bem controlados. Um exemplo deste tipo de sistema são os circuitos supercondutores, que possuem amplas aplicações em diversas áreas da Física. Conceitos importantes, discutidos até então apenas teoricamente, como a relação entre entropia e informação e até mesmo implementações de Demônios de Maxwell começaram a ser estudados experimentalmente. Naturalmente, neste novo cenário de sistemas de pequenas escalas sujeitos a processos fora do equilíbrio, é esperado que a Termodinâmica usual, aplicada ao estudo de objetos macroscópicos, tenha que ser expandida para a inclusão de efeitos quânticos. O objetivo deste projeto, que se encontra no contexto da área emergente denominada de Termodinâmica Quântica, é o desenvolvimento de uma versão quântica de um Demônio de Maxwell autônomo, ou seja, que atua sem a presença de um agente externo, em um sistema composto por dispositivos supercondutores. A idealização desta implementação é composta por dois Cooper Pair Boxes (CPB's), que assumem conjuntamente o papel de Demônio ao atuar em um sistema representado por um Assymetric Single Cooper Pair Transistor (ASCPT). (2) A interação entre o Demônio, que se encontra imerso em um banho térmico, e o sistema é tal que, dependendo do estado deste último, o Demônio atua produzindo um feedback, caracterizado apenas pela troca de informação com o sistema. Esta ação induz o sistema a realizar transições para estados de mais alta energia, levando a uma dinâmica característica do paradoxo proposto por Maxwell.

Palavras-chave: Demônio de Maxwell. Qubits supercondutores. Termodinâmica quântica.

Referências:

1 LEFF, H.; REX, A. F. (Eds.) **Maxwell's demon 2**: entropy, classical and quantum information, computing. Bristol: Institute of Physics, 2003.

2 KOSKI, J. V. et al. On-chip Maxwell's demon as an information-powered refrigerator. **Physical Review Letters**, v. 115, n. 26, p. 260602-1-260602-5, Dec. 2015.

PG98

Utilizando o sistema e-Disciplinas como ferramenta de apoio, planejamento e avaliação de metodologias ativas no Ensino de Física

MARTINS, R. D. S.; ONO, B. A.; MUNIZ, S. R.

robson.martins@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O sistema e-Disciplinas é o sistema de apoio às disciplinas de graduação e pós-graduação da USP, oferecendo uma série de recursos aos seus usuários. Atualmente, o sistema tem mais de 120 mil usuários inscritos na plataforma, e em 2017 atendeu cerca de 40 mil alunos e 3 mil docentes da USP, que acessaram regularmente o sistema. Porém, a grande maioria dos ambientes de disciplinas ainda se restringe ao uso de recursos que essencialmente o tornam apenas um repositório de conteúdo estático, na sua maioria em forma de textos e arquivos no formato PDF. Neste trabalho iremos ilustrar, através de vários exemplos práticos, como o e-Disciplinas pode ser utilizado como uma versátil ferramenta para viabilizar o uso de metodologias ativas de aprendizagem, no ensino de cursos de Física Básica, oferecidos pelo Instituto de Física de São Carlos. Serão apresentados diversos exemplos, utilizados em vários cursos presenciais do IFSC, desde os cursos de bacharelado (oferecidos tanto no IFSC como para outras unidades do campus) até o curso de Licenciatura em Ciências Exatas, também do campus de São Carlos. Além desses exemplos práticos, iremos discutir como essas ferramentas podem ser usadas no planejamento (em tempo real) de algumas atividades do curso e na avaliação dos objetivos didáticos dessas disciplinas, além de poder, a princípio, mensurar os níveis de intensidade, engajamento e assiduidade com que o aluno se envolve nos cursos. Em particular, iremos mostrar a forte correlação positiva que há entre certas atividades online (dinâmicas e integradas ao andamento das disciplinas presenciais) e o desempenho dos estudantes aprovados nessas disciplinas. Também será apresentado como os vários recursos de informações do sistema podem ser utilizados para acompanhar o progresso dos alunos durante o curso, desde as primeiras semanas de aula, inclusive na detecção precoce de aluno sob risco de fracasso nas disciplinas.

Palavras-chave: Tecnologias de ensino. Metodologias ativas. e-Disciplinas e Moodle da USP

Referências:

1 SALVADOR, J. A.; PITON, J. O MOODLE como ferramenta de apoio a uma disciplina presencial de ciências exatas.Disponível em: <https://www.dm.ufscar.br/profs/jpiton/artigos/artigo_final_-Cobenge_salvador_jean_2006.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2018.

2 REIS, M. L. Recensiones / Receções. **Revista Iberoamericana de Educación**, n. 51, p. 263-266, 2009.

PG99

Formação de nanoestruturas em prata maciça com laser femtosegundo para aumento de fluorescência: nova perspectiva em desenvolvimento de biosensor

MATTOS, V. S. [1]; PAOLILLO, F. R. [1]; CAVALLINI, D. [1]; YASUOKA, F. M. M. [1]; GUIMARAES, F. E. G. [1]; SILVA, M. A. P. [1]; CASTRO NETO, J. C. [1]

vicente.mattos@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

LIPSS (Laser Induced Periodical Surface Structures) são estruturas periódicas formadas na superfície de materiais quando estes interagem com lasers de alta intensidade, e possuem relação direta com o comprimento de onda do laser utilizado. No processo de formação destes LIPSS, os elétrons da superfície absorvem a radiação incidente e a estrutura metálica se funde localmente, num processo com duração da ordem de nanosegundos com efeito apenas na escala nanométrica do material. Com o restabelecimento do equilíbrio térmico, o metal se solidifica e se auto organiza, o que dá forma às nanoestruturas. (1) Estruturas com estas propriedades são conhecidas por aumentarem localmente o campo elétrico incidido sobre elas, o que pode gerar aumento da intensidade de fluorescência (MEF - Metal Enhanced Fluorescence) (2) ou de maior espalhamento Raman (SERS - Surface Enhanced Raman Spectroscopy) caso haja uma molécula de interesse próxima das mesmas.O objetivo do atual estudo foi desenvolver e analisar o processo de formação de nanoestruturas em placas maciças de prata polida e investigar os efeitos destas nanoestruturas sobre a fluorescência.Todas as amostras foram preparadas em placas de prata pura maciça polida até a granulação do abrasivo (alumina) de 0,05 μm para a obtenção da menor quantidade possível de riscos que podem interferir na criação de nanoestruturas (na mesma ordem de grandeza dos riscos). As marcações foram feitas utilizando um Laser Libra femtosegundo Ti:Safira da Coherent com taxa de repetição de 1 kHz e comprimento de onda de 805 nm (banda de 795 e 810 nm) e largura de pulso de 100 fs e foi utilizado o software EZCAD 2 para controle dos parâmetros de marcação. Os parâmetros variados para as marcações foram a velocidade de varredura, distância entre linhas consecutivas de marcação, número de repetições da varredura e distância da amostra ao foco do laser. A relação entre estes parâmetros determina a sobreposição entre os pulsos, o que influencia na energia transferida ao material e efeitos observados sobre ele. Para investigar os efeitos das nanoestruturas sobre a fluorescência, foi depositada solução de Protoporfirina IX em etanol na concentração de 5 μg/ml sobre a placa e a mesma foi analisada utilizando o microscópio confocal de fluorescência.Utilizando os parâmetros de 5-7 mm/s de velocidade de varredura, distância entre linhas variando de 0,0001 a 0,0025 mm e distância ao foco do laser de 0,1 à 1,8 mm foi possível criar diferentes formas de nanoestruturas periódicas ou não na prata. Quando havia periodicidade, esta era da ordem de 400-500 nm, indicando a formação de LIPSS. Foi constatado aumento da fluorescência de ao menos 10 vezes na amplitude do sinal das amostras quando comparado com a região sem nanoestruturas (superfície de prata polida).

Palavras-chave: LIPSS. Fluorescência. Femtosegundo. MEF. Prata.

Referências:

1 GUREVICH, E. L.; GUREVICH, S. V. Laser induced periodic surface structuresiInduced by surface plasmons coupled via Roughness. /hrefhttps://www.sciencedirect.com/science/journal/01694332**Applied Surface Science,** v.32, p.118-123,2014.

2 LISMONT, M.; FRANÇOIS, A.; DREESEN, L.; MONRO, T.M. Metal enhanced fluorescence: effect of surface coating. **Proceedings of SPIE,** n.8957, 2014. doi:1117/12.2040788.

PG100
Time and Coherence

MENdeS, L. R. S. [1]
lrs.mendes@usp.br
SOARES-PINTO, D. O. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Although everyone could agree that time passes when questioned about the nature of time, if it is only a parameter or an observable, mixed answers would be given. Some (or perhaps most) would state that time is nothing more than a parameter that appears in Schrodinger's equation and it is representative of a classical clock on the wall of a laboratory. Others would want to elevate time to an observable and put it on an equal footing to other quantities as position and momentum in a similar way that was done in special relativity. What it seems is that if time really is an observable it is an inaccessible one. One solution for the seemingly inaccessibility of time was given by Page and Wootters. (1) They argued that time could not be observed because there may exist a superselection rule (SSR) for the energy, in a similar way that there is a SSR for charge. This statement leads to the question: If there is an SSR for the energy how do we agree that time passes? Page and Wootters proposed that time emerges from correlations between the subsystems in a way that part or parts of the subsystem act as clocks for the rest, and in respect to which the time flows. Using the framework of resource theories of coherence (2) we propose a measure that captures the relational character of the mechanism, showing that it is the internal coherence the necessary ingredient to the emergence of time in the Page-Wootter's model. (3) Also, we connect it to works done in quantum thermodynamics, showing that it is directly related to the extractable work from quantum coherence.

Palavras-chave: Page and Wotters. Coherence. Time.

Referências:

1 Page, D. N.; Wootters, W. K. Evolution without evolution: dynamics described by stationary observables. **Physical Review D**, v. 27, n. 12, p. 2885, 1983.

2 STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: quantum coherence as a resource. **Reviews of Modern Physics**, 89, n. 4, p. 041003, 2017.

3 MENDES, L. R. S.; SOARES-PINTO, D. O. **Time as a consequence of internal coherence**. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1806.09669.pdf>. Acesso em: 30 abr. 2018.

PG101
Estudos sobre a polimerização de septinas e sua organização

MENdoNÇA, D. C. [1]; ARAUJO, A. P. U. [1]; PORTUGAL, R. V. [2]; GARRATT, R. C. [1]

deborah.mendonca@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Laboratório Nacional de Nanotecnologia - CNPEM

Septinas são proteínas da família das GTPases e estão envolvidas em uma série de processos intracelulares, incluindo divisão celular, tráfico de vesículas, exocitose, entre outros.(1) As septinas possuem a capacidade de interagirem com elas mesmas e polimerizar na forma de hetero-oligômeros, resultando em filamentos que subsequentemente se organizam em estruturas de mais alta ordem, porém o mecanismo de como essa associação ocorre ainda é desconhecido.(2) Essas proteínas são encontradas em vários eucariotos superiores, mas estão ausentes em plantas. Em seres humanos, foi observado que alterações nos níveis de expressão das septinas estão associadas com algumas patologias, como alguns tipos de câncer e doenças neurológicas. (1) Porém, há ainda muitas informações sobre tais moléculas não esclarecidas, como seu papel na hidrólise de GTP e mecanismo de ação. Portanto, este projeto objetiva análises de complexos de septinas ainda não estudados em termos estruturais, através da técnica de microscopia eletrônica de transmissão com análises de partícula única. Em humanos, há 13 genes que codificam septinas, classificadas em quatro grupos quanto à similaridade em relação à estrutura primária.(2) O complexo SEPT2-SEPT6-SEPT7 foi o melhor caracterizado, com uma estrutura cristalina resolvida à 4 Å(1) e foi sugerido que em altas concentrações salinas, o complexo se organiza em forma de hexâmero, com a SEPT7 se localizando nas duas extremidades. Durante o projeto de mestrado, foi possível observar que o complexo que possui a SEPT5, que pertence ao mesmo grupo da SEPT2 e que a substitui no complexo, se organiza na forma inversa, com a SEPT5 na extremidade. Por isso, o complexo estudado e consagrado nos estudos sobre septinas, composto por SEPT2/6/7 está sendo analisado neste projeto para confirmar sua organização através da técnica de microscopia eletrônica de transmissão, incubando-se o anticorpo com o complexo purificado *in vitro*. Os resultados deste trabalho contribuirão para o avanço no entendimento dos heterocomplexos de septinas e de como essas proteínas interagem entre si nesse arranjo.

Palavras-chave: Septinas. Microscopia eletrônica de transmissão. Análise de partícula única.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. et al. Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

2 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 13, n. 3, p. 183-194, 2012.

PG102

Estudos estruturais dos complexos reguladores do curli bacteriano PdeR/DgcM e PdeR/DgcO em E. coli e estudos de estrutura-atividade de inibidores da CdaA de S. aureus

MENEGHELLO, R. [1]; NAVARRO, M. V. A. S. [1]

raphael.meneghello@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Todos os organismos possuem vias de sinalização mediadas por vários segundo-mensageiros. Especialmente em bactérias, os segundos-mensageiros baseados em nucleotídeos cíclicos diméricos, c-di-GMP e c-di-AMP possuem um papel essencial. Já largamente estudado, o c-di-GMP controla processos que envolvem a motilidade, aderência, produção da matriz extracelular e arquitetura do biofilme bacteriano. A concentração intracelular de c-di-GMP é dinamicamente controlada por diversas diguanilato ciclases (DGC) e fosfodiesterases (PDE) que sintetizam e hidrolisam o c-di-GMP, respectivamente. Dependendo da interação entre diferentes DGC e PDE, forma-se *pools* locais de c-di-GMP com específicas funções na célula. Em *Escherichia coli*, o sistema formado pelas diguanilato ciclases DgcM e DgcO, junto com a fosfodiesterase PdeR formam um *pool* que controla a formação do *curli* bacteriano. (1) A presença do *curli* aumenta a adesão bacteriana às células do hospedeiro. Em baixos níveis de c-di-GMP, a PdeR inibe a DgcM, impedindo a expressão do regulador CsgD, que controla a transcrição do operon csgBAC, responsável pela formação do *curli*. Em níveis altos, a PdeR libera a DgcM, que ativa a transcrição do operon csgDEFG, iniciando a expressão da CsgD. A DgcO, atua como um sensor de oxigênio e também regula a transcrição do gene csgBAC. Em condições anóxicas, a transcrição é dramaticamente reduzida. (2) Mais recentemente, o c-di-AMP emergiu como uma molécula essencial para as bactérias que possuem vias de sinalização baseadas nesse nucleotídeo, controlando desde processos metabólicos, até o escaneamento do DNA em busca de danos. Seus níveis também são estritamente controlados por diadenilato ciclases (DAC) e fosfodiesterases. Diferentemente do sistema controlado por c-di-GMP, em que há uma variedade de diguanilato ciclases, a maioria das bactérias possuem apensa um tipo de diadenilato ciclase, como em *Staphylococcus aureus*, o que a transforma é um bom alvo molecular, já que é a única fonte produtora de c-di-AMP. (3) Nesse trabalho, busca-se entender os mecanismos de interação entre as diguanilato ciclases DgcM e DgcO e a fosfodiesterase PdeR por meio de ensaios cristalográficos do complexo interagente e por ensaios bioquímicos para aferir a afinidade e dependência do c-di-GMP na formação do complexo. Ainda, ensaios cristalográficos e bioquímicos do complexo enzima-inibidor da diadenilato ciclase de *S. aureus* CdaA foram realizados para inferir a afinidade de potenciais inibidores frente a CdaA. Os resultados gerados aqui podem contribuir para o avanço dos estudos em diadenilatos ciclase como novo alvo terapêutico, principalmente em bactérias multirresistentes, como a MRSA (*Staphylococcus aureus* meticilina-resistente) e elucidar estruturalmente o processo responsável pela formação de biofilmes bacterianos.

Palavras-chave: Diguanilato ciclase. Diadenilato ciclase. Inibidores.

Referências:

1 SARENKO, O. et al. More than enzymes that make or break cyclic Di-GMP: local signaling in the interactome of GGDEF/EAL domain proteins of *Escherichia coli*. **mBio**, v. 8, n, 5, p. e01639-17-1-

e01639-17-18, 2017.

2 TAGLIABUE, L. et al. The yddV-dos operon controls biofilm formation through the regulation of genes encoding curli fibers' subunits in aerobically growing *Escherichia coli*. **FEMS Immunology & Medical Microbiology**, v. 59, n. 3, p. 477-484, 2010.

3 CORRIGAN, R. M.; GRÜNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology**, v. 11, n. 8, p. 513-524, 2013.

PG103

Transverse section image of a mass vortex lattice in a Bose-Einstein condensate

MERCAdo-GUTIERREZ, E. D. [1]; TAVARES, P. E. S. [1] FARIAS, K. M. [1]

emmanuel.dv@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, we are going to show the last updates in produce a mixture of a two component Bose-Einstein condensate (BEC), to study the interaction between two atomic species, sodium and potassium. Through well know techniques to cool atoms, we have 1E6 atoms of sodium condensed at 150 nK confined in an optical dipole trap (ODT). By the other hand, After the MOT loading, we used the gray molasses technique to cool Potassium atoms below the doppler limit, reaching temperatures below to 30 uK with approximately 1.4E8 atoms. (1) With both atomic species cooled and trapped, we produce vortex lattice of sodium atoms in the presence of potassium atoms. Using a stirring beam focused on the Sodium BEC, we transfer angular momentum to the cloud to produce quantized vortices, which are visualized using a slide with 60 um width of repumping light to see only the atoms in the middle of the cloud. (2) Potassium atoms are carried on to the final stage with the propose to determine if it is possible to localize cooled potassium atoms into the holes of the vortex lattice. (3) The dynamics of the vortex are studied measuring the life time and dependence of frequency with the number of quantum vortices nucleated.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensate. Gray molasses. Vortex lattice.

Referências:

1 SALOMON, G. et al. Gray-molasses cooling of 39K to a high phase-space density. **EPL**, v. 104, n. 6, p. 63002-p1-63002-p6, 2013.

2 ABO-SHAEER, J. R. et al. Observation of vortex lattices in Bose-Einstein condensates. **Science**, v. 292, n. 5516, p. 476-479, 2001.

3 MASON, P.; AFTALION, A. Classification of the ground states and topological defects in a rotating two-component Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 84, n. 3, p. 033611-1-033611-15, 2011.

PG104

Efeito Raman para identificação de seguimentos de ácidos nucleicos

MIRANda, M. M. P.[1]; MAREGA, E.[1]

messiasmpm@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A caracterização das propriedades ópticas de moléculas de DNA, tais como a absorção e a fluorescência por excitação, são importantes para a determinação de parâmetros usados no desenvolvimento de biossensores fotônicos. O estudo da absorção óptica do DNA, obtido por diferentes métodos tem se mostrado muito eficiente na determinação do grau de pureza do material genético obtido por amplificação, ou extração e purificação do DNA total. Por outro lado, a fluorescência por excitação a partir de um marcador cromóforo é uma técnica importante em processos de quantificação de massa, em técnicas tais como a eletroforese em gel de agarose. Devido à baixa fluorescência de moléculas de DNA na região visível do espectro, entre 500-600nm, utiliza-se destes marcadores que se ligam à molécula e que são opticamente ativos nesta região para detecção de sua emissão de fluorescência. (1-2) Neste trabalho foi realizado um estudo da fluorescência do DNA, na região de 400nm a 600nm, sem adição de marcador e utilizando excitação por um e dois fótons (405nm e 800nm) através da técnica de espalhamento Raman (SERES). As amostras contendo solução de dsDNA serão depositadas sobre um filme de prata de 200nm de espessura desenhado sobre um substrato de vidro. Sobre o filme metálico é fabricado nanoestruturas metálicas por de litografia por feixe de íons com um microscópio de duplo feixe FEI Quanta 3D 200i. As nanoestruturas são formadas por arranjos concêntricos de anéis com diâmetros de até 20 μm, largura 50nm e separados por 400nm. Quando a excitação do material genético ocorre sobre a nano-estrutura o laser gera na nanoestrutura plasmon-polaritons de superfície (SPP) que interagem com as moléculas de dsDNA na solução, aumentando o efeito do espalhamento Raman. Observa-se que nas regiões onde as nanoestruturas são fabricadas que a intensidade de fluorescência da macromolécula é muito maior do que a obtida fora da estrutura e sobre o filme metálico. Os efeitos da interação entre SPPs e as moléculas aumentam a atividade óptica (taxa de emissão) que associadas ao melhoramento do efeito Raman podem servir como base para a fabricação de sensores fotônicos ultra-sensíveis; pois elimina ruídos que possam comprometer a identificação fiel de cada nucleotídeo da composição dos ácidos nucleicos.

Palavras-chave: Luminescência. Plasmons-polaritons. Biossensores.

Referências:

1 LIEDBERG, B.; LUNDSTR, O. M. I.; STENBERG, E. Principles of biosensing with an extended coupling matrix and surface plasmon resonance. **Sensors Actuators B,** v. 11, n. 10, p. 63-72, 1993.

2 GAVA, V. A. E. Eletrochemical molecular analysis without nucleic acid amplification. **Methods**, v.8, n.1, p. 2043-2081, 2008.

PG105

Descelularização de traqueia utilizando equipamento multifuncional

MION, W. [1]; GUIMARÃES, F. E. G. [1]; BAGNATO, V. S [1]; deFFUNE, E. [2]

wonermion@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Faculdade de Medicina de Botucatu - UNESP

RESUMO

Problemas traqueais oriundos de estenoses adquiridas, congênitas, processos traumáticos, câncer e infecção continuam sendo um grande problema para medicina. (1) A produção de órgãos descelularizados e recelularizados por técnicas de bioengenharia de tecidos vêm crescendo como uma tentativa de solucionar esta problemática. (2) No entanto, a produção de órgãos descelularizados envolve um processo laborioso, por suas múltiplas etapas complexas e de alto custo (3), além de apresentarem resultados divergentes de reprodutibilidade na literatura O objetivo deste doutorado é elaborar um equipamento multifuncional que conjugue na mesma plataforma processos controlados da ação de solução Dodecil Sulfato de Sódio(SDS), ultrassom, aplicação de luz LED, sob agitação constante e lavagens com soluções de PBS, intuito de garantir um *scaffold* com padrões de qualidade aceitáveis e reprodutíveis, quanto as características mecânicas e físico-químicas. O projeto foi segregado em duas etapas. Etapa 1 – Elaboração e construção do equipamento. Etapa 2 - Obtenção e descelularização das traqueias. As traqueias serão segregadas em 4 grupos: Grupo controle, 1ciclo de descelularização, 2 ciclos e 3 ciclos. Todas as traqueias sofrerão análises histomorfológicas, ensaios mecânicos, testes de citotoxicidades e biocampatibilidades. A construção do equipamento foi finalizada, está sendo solicitada a patente do mesmo. Os primeiros testes do tratamento das traqueias apresentaram bons resultados quando comparados ao grupo controle. O grupo de 1 ciclo de descelularização apresentou 89% de remoção de DNA. Testes de força tensil mostrou uma queda de 20%, esperada em tecidos após tratamentos de descelularização. O grupo controle também apresentou heterogeneidade na força tensil, com desvio de aproximadamente 10% para força máxima em relação à média. A análise de quantificação de colágeno por Microscopia Confocal demonstrou uma distribuição do colágeno de modo entrelaçado (vertical e horizontal) formando uma superfície homogênea em ambos os grupos. Os resultados parciais se mostram bem promissores em relação aos protocolos de descelularização. No entanto, ainda faz se necessário a analise histomorfologicas e citotoxidades do grupo já descelularizado assim como a finalização dos outros grupos.

Palavras-chave: Traqueia. Descelularização. Equipamento Multifuncional.

Referências:

1 LOTT, D. G. What is the future of 'organ transplantation' in the head and neck? **Current Opinion in Otolaryngology and Head and Neck Surgery**, v. 22, n. 5, p. 429-435, Oct. 2014.

2 ROWLAND, C. R.; LITTLE, D.; GUILAK, F. Factors influencing the long-term behavior of extracellular matrix-derived scaffolds for musculoskeletal soft tissue repair. **Journal of Long-Term Effects of Medical Implants**, v. 22, n. 3, p. 181-193, 2012.

3 MACCHIARINI, P. et al. Clinical transplantation of a tissue-engineered airway. **Lancet**, v. 372, n. 9655, p. 2023-2030, Dec. 2008.

PG106

Representação e caracterização de circuitos amplificadores operacionais através de grafos

MIRANda, W. M. [1]; COSTA, L. F. [1]

willianmulia@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde muito tempo, grafos são considerados úteis para a física teórica, economia, sociologia e biologia. Porém atualmente já se tornram uma potente ferramenta também para representar e modelar os mais diversos fenômenos nas mais diversas áreas. (1) No ramo da eletrônica, existe uma grande variedade de circuitos eletrônicos amplificadores operacionais, sendo muitos desses com funções similares ou complementares. Tendo base que circuitos eletrônicos (digitais e analógicos) podem ser representados por grafos e que também podem apresentar padrões redes complexas do tipo pequeno mundo ou "*small world*" quando devidamente representados (2), a pesquisa em questão busca representar e caracterizar circuitos amplificadores operacionais (no nível de componentes eletrônicos) por grafos, os quais terão medidas aferidas com finalidade de identificar possíveis agrupamentos de tipos de circuitos. Através de programas, são criados grafos baseados nas arquiteturas dos circuitos amplificadores operacionais em questão, levando em conta o tipo, a distribuição e polarização de cada componente eletrônico presente em cada circuito estudado e modelado nesta pesquisa. Por meio da utilização da biblioteca aberta *iGraph*, através da linguagem de programação R, é feita a visualização dos grafos e aferidas as medidas necessárias para o auxilio na identificação dos parâmetros divergentes em cada rede ou circuito. Com isso, esperamos poder entender melhor a diversidade destes dispositivos eletrônicos cujos quais possuem grande utilização atualmente.

Palavras-chave: Redes complexas. Grafos. Amplificadores operacionais.

Referências:

1 COSTA, L. F. et al. Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of applications. **Advances in Physics**, v. 60, n. 3, p. 329-412, May/June 2011.

2 CANCHO, R. F; JANSSEN, C; SOLÉ R. V. Topology of technology graphs: small world patterns in electronic circuits. **Physical Review E**, v. 64, n. 4, p. 046119-1-046119-5, Sept. 2001.

PG107
Transições de fase em magnetos frustrados

MIRANda, M. M. J. [1]; HOYOS NETO, J. A [1]

michelmjmiranda@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Simulações de Monte Carlo clássico indicam que a transição de fase Palmer-Chalker/Paramagneto em pirocloros de plano fácil é de primeira ordem. (1) Todavia, este resultado vai de encontro com os experimentos que mostram uma transição de fase contínua. (2) Como os experimentos foram realizados na região de transição de fase quântica entre a fase Palmer-Chalker e a fase ψ_2 , selecionada através do mecanismo conhecido como ordem-por-desordem (3), pretendemos investigar o papel das flutuações quânticas nesta transição. Nossa estratégia se baseia em estudar a ação efetiva para a transição, incorporando flutuações quânticas através da aproximação $1/S$ de ondas de spin. Dessa forma, esperamos entender melhor a relação entre flutuações quânticas e térmicas em magnetos frustrados.

Palavras-chave: Transições de fase. Sistemas frustrados. Ordem por desordem.

Referências:

1 YAN, H. et al. Theory of multiple-phase competition in pyrochlore magnets with anisotropic exchange with application to Yb2Ti2O7, Er2Ti2O7 and Er2Sn2O7. **Physical Review B**, v. 95, n. 9, p. 094422-1-094422-39, 2017.

2 SHIRAI, M. et al. Doping-induced quantum crossover in Er2Ti2-xSnxO7. **Physical Review B**, v. 96, n. 18, p. 180411-1-180411-5, 2017.

3 HENLEY, C. L. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 17, p. 2056-2059, 1989.

PG108
A multi-dimensional elephant Random Walk Model

MARQUIONI, V. M. [1]; MAIA, L. P. [1]

vimarqmon@gmail.com

[1]Instituto de Fisica de Carlos - USP

Random Walk models are widely used in describing stochastic process in which the observed phenomena can be viewed as a sum of random variables. In this context, the central limit theorem is a fundamental result, but it cannot be applied if the random variables are not independent, which is the case when the considered walk presents memory mechanisms. In this work, we study the Elephant Random Walk, ERW, an one-dimensional and discrete time random walk, proposed in 2004, which has a well defined memory mechanism.(1) The walker (said to be na elephant) walks randomly on the $\mathbb{Z}^1$Z1 -line, to the left or to the right, following a probability rule which takes into account all the steps given in the past. The behaviour is determined by a simple parameter and can exhibit anomalous diffusion, which is a fundamental result of this model. We propose a multi-dimensional generalization of the ERW, interpreting different directions as different walkers, coupling them all in a way that each walker might remember the whole past of all walkers. From this multi-dimensional extention, we build a bidimensional model, with specific coupling coefficients, called Cow-Ox Model, in which the first direction does not depend on the second, but the latter depends on the former.(2) We showed this model also exhibits anomalous diffusion behaviour, but there are other two different newsworthy behaviours when considering the displacement average, named attractive and repulsive behaviours. We also calculate the bidimensional jumping process equation to this random walk and a continuum limit approach can be found in first order, corresponding to an approximation to long-time limit.

Palavras-chave: Elephant Random Walk. Stochastic process. Anomalous diffusion.

Referências:

1 SCHUTZ, G.M.; TRIMPER, S. Elephants can always remember: exact long-range memory effects in a non-Markovian random walk. **Physical Review E**, v. 70, pt.2, p.045101, 2004.

2 MARQUIONI, V.M. **Multi-dimensional Elephant Random Walk with Coupled Memory**. Disponivel em:< https://arxiv.org/pdf/1806.04173.pdf>. Acesso em: 03 set. 2018.

PG109
CQESTR, avaliação em solos e manejos do Brasil.

deVAI-MORAES, R.R. [1] ; VILLAS BOAS, P. R.[2]

raphael.moraes@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[3]InMBRAPA Instrumentação de São Carlos

Mudança no regime de chuvas, recordes extremos de temperaturas, são algumas mudanças climáticas ocorridas na Terra devido ao aumento do efeito estufa no último século. Este é um efeito natural que tem sido aumentado pela ação antrópica, como queima de combustíveis fosseis, desmatamentos, queimadas e mudanças no uso e ocupação do solo. Entretanto, é desse mesmo solo que pode vir a solução ou, ao menos, formas de mitigar causas e consequências do efeito estufa. Visto que a causa é a emissão de gases de efeito estufa, principalmente o CO2, para a atmosfera, uma solução seria a captura desse gás, prendendo o carbono a um reservatório, por exemplo o solo. Para isso é necessário encontrar formas de uso de solo mais conservacionistas, como o plantio direto na palha e sistemas integrados de lavoura, pecuária e floresta. Uma alternativa é buscar a melhor combinação de manejo e culturas simulando o comportamento de solo por longos períodos de tempo. Existem vários modelos para este fim e, neste trabalho, focamos no modelo de simulação de ciclos de carbono no solo CQESTR, um trocadilho em inglês para sequestrador de Carbono. O CQESTR é um modelo físico estatístico, empírico, que simula a quantidade de C presente no solo, chamado de estoque de carbono, a partir de dados climáticos, composição do solo, pluviometria, tipo de manejo e cultura plantada por meio do cálculo da decomposição da matéria orgânica em 3 fases: decomposição rápida, decomposição lenta e decomposição de matéria orgânica estabilizada. Este modelo tem sido testado com boa acurácia em vários países, em particular nos Estados Unidos, seu país de origem, tendo sua segunda versão, proposta por LIANG et al. (1), expandido seu uso para outros países. Para estudar o desempenho do modelo em simular solos e culturas brasileiros, compilamos dados de 3 sítios, localizados em 3 unidades federativas, PR, DF e RS. No experimento do DF, uma pastagem com Brachiaria SPP. que sucedeu uma plantação de cultivo tradicional, obtemos um erro relativo ao experimento no campo de menos de 1% No experimento do PR, uma rotação de soja/milho/trigo% em manejos tradicionais, reducionistas e em plantio direto, obtemos nesse último um erro menor que 7% em relação aos resultados de campo. E no experimento do RS, uma rotação anual de trigo e soja, em cultivos tracionais e plantio direto, obtemos uma diferença entre experimento de campo e simulação menor que 2%. Estes resultados nos permitem afirmar que para manejos pouco agressivos ao solo o modelo simula de forma muito satisfatório o estoque de carbono no solo, podendo ser uma boa ferramenta para escolha de cultura ou mesmo para previsão de estoque de carbono futuro no solo de uma propriedade.

Palavras-chave: CQESTR. Sequestro de carbono.

Referências:

1 LIANG, Y. et al. Simulating soil organic matter with CQESTR (v. 2.0): model description and validation against long-term experiments across North America. **Ecological Modelling**, v. 220, n. 4, p. 568–581, 2009.

PG110

Time reversal in operational-probabilistic theories applied to quantum collision theory

MORAZOTTI, N. A. C. [1]

nicolas.morazotti@gmail.com

NAPOLITANO, R. J. [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

In the standard formulation, quantum mechanics is not symmetric under time reversal. If we just reflect time, Born's transition-probability rule does not apply anymore. In 1964, Aharonov, Bergmann, and Lebowitz propposed a new quantum theory formulation, symmetric under time reversal. It involves the notion of post-selection. Symmetry transformations, in the usual quantum theory, are given by Wigner's Theorem: any given symmetry transformation is either linear and unitary or antilinear and antiunitary, which is in fact the case of time reversal. In the standard notion of quantum mechanics, a time reversal transformation takes any state and maps it into another state. To treat the problem of asymmetry, Oreshkov and Cerf (1) use a distinct description of quantum mechanics, named Operational-Probabilistic Theory (OPT). In it, we associate diagrams connecting different operations - which describe transformations we make in the experiment - via wires - describing the path our experiment takes from one transformation to another. If the operation input is a trivial system, it is called a preparation. Conversely, if the output is the trivial system, it is called a measurement. Circuits are diagrams composed by wires and boxes with no open wires. In such theories, usually you have causality as an axiom that gives us issues with time symmetry. The authors discuss a generalized formulation for OPTs which gives us both causality and time symmetry by describing possible events in a given box, conditional on information obtained without looking into other boxes in the circuit, irrespectively of when the information is available. After generalizing the framework, they obtain the forms to map the space of states in the space of effects and vice-versa. Following Leonardo, Carlos and Reginaldo (2), in this work we apply such theory describing the experiment of weak-measurement proposed by Aharonov, Albert and Vaidman (3), obtaining the probability of scattering via an interaction potential of the form $H_{int} = -\eta g(t)\mathbf{R} \cdot \overleftrightarrow{\mathrm{H}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. We obtain the same probability given by Leonardo et al. The generalized symmetry transformations, as described by Oreshkov and Cerf, must be applied to finite-dimensional systems. Therefore, we truncated and discretized the experiment so that we could describe the experiment in a time-symmetrical fashion. Also, we conclude that the probabilities in both directions of time are the same. Then we give directions to continue this investigation.

Palavras-chave: Operational-probabilistic theories. Time reversal. Quantum collision theory.

Referências:

1 ORESHKOV, O.; CERF, N. J. Operational formulation of time reversal in quantum theory. **Nature Physics**, v. 11, n. 10, p. 853–858, 2015.

2 CASTRO, L. A. de; BRASIL, C. A.; NAPOLITANO, R. de J. Weak values in collision theory. **Annals of Physics**, v. 392, p. 272-286, 2018. /hrefhttps://doi.org/10.1016/j.aop.2018.03.014doi.org/10.1016/j.aop.2018.03.014.

3 AHARONOV, Y.; ALBERT, D. Z.; VAIDMAN. L, How the result of a measurement of a component

of the spin of a spin-1/2 particle can turn out to be 100, **Physical Review Letters,** v. 60, n. 14, p 1351, 1988.

PG111

Multifractality at the phase transition of 3D Anderson localization of light

MOREIRA, N. A. [1]; BACHELARD, R. P. M. [2]

noel.araujo.moreira@gmail.com

[2]Departamento de Fìsica - UFSCar

[1]Instituto de Fìsica de São Carlos - USP

A blue sky, a white cloud or a red sunset are explained by classical multiple scattering theory of light. However, these phenomena ignore light interference. Once it is taken into account, may occur that light interfere in such way that it does not propagate in the medium, effect known as Anderson Localization and was first discovered for electrons in disordered solids, but it also applies to sound or light waves. In 3D models, such effect shows a phase transition between localization and non-localization, and multifractal structures may be found studying wavefunctions spatial distribution or energy spectrum of the system. (1) However, no study of multifractality analysis over Light Anderson localization has been reported. In this paper we simulate a cold atom cloud with long-range interactions via light scattering. Our disorder parameter is the volumetric density, Increasing it, we can find a phase transition, accompanied by a decrease in order of magnitude of decay rates of a subset of modes. (2) The nature of the phase transition is investigate using multifractals statistics applied over wavefunctions squared of the system. Results shows that multifractality increases with density, even beyond the phase transition, differently from other systems, where multifractality appears only at the critical point. A blue sky, a white cloud or a red sunset are explained by classical multiple scattering theory of light. However, these phenomena ignore light interference. Once it is taken into account, may occur that light interfere in such way that it does not propagate in the medium, effect known as Anderson Localization and was first discovered for electrons in disordered solids, but it also applies to sound or light waves. In 3D models, such effect shows a phase transition between localization and non-localization, and multifractal structures may be found studying wavefunctions spatial distribution or energy spectrum of the system. (1) However, no study of multifractality analysis over Light Anderson localization has been reported. In this paper we simulate a cold atom cloud with long-range interactions via light scattering. Our disorder parameter is the volumetric density, Increasing it, we can find a phase transition, accompanied by a decrease in order of magnitude of decay rates of a subset of modes. The nature of the phase transition is investigate using multifractals statistics applied over wavefunctions squared of the system. Results shows that multifractality increases with density, even beyond the phase transition, differently from other systems, where multifractality appears only at the critical point.

Palavras-chave: Multifractal. Light Anderson localization. Phase transition.

Referências:

1 EVERS, F.; MIRLIN, A.D. Anderson transitions. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, n. 4, p. 1355–1417, 2008.

2 SKIPETROV, S.E.; SOKOLOV, I. M. Absence of Anderson localization of ight in a Random ensemble of point scatterers. **Physical Review Letters**, v.112, n. 2, p. 023905, 2014

PG112
Estudo de vidros fosfatos mistos de Li, Cs e Sr

MORGUETTO, G. F. [1]

gabrielfmorguetto@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos:Ao adicionar-se íons alcalinos em um sistema vítreo, o mesmo passa a apresentar condutividade iônica, tornando-se interessante para a aplicação em baterias e em sensores. No entanto, com a mistura de mais de uma espécie iônica móvel, há um decaimento na condutividade, e são apresentadas não-linearidades em propriedades do material.Um modelo que tenta explicar esse efeito de íons mistos (EIM) denomina-se "Random Ion Distribution Model" (RIDM), tendo como hipóteses a mistura aleatória das espécies móveis e a presença de sítios de ocupação diferentes para cada íon. (1) Assim, perturbamos um sistema vítreo Li-Cs metafosfato (que apresenta intenso EIM) com a adição de Sr, um íon de potencial iônico próximo ao do Li, mas pouco móvel, verificando se as hipóteses do RIDM se mantem válidas.Métodos e Procedimentos:Variou-se a concentração de cada íon na composição das amostras de metafosfatos vítreos, para verificar variações dos parâmetros estruturais do sistema perturbado. Para tal, utilizou-se técnicas de ressonância magnética nuclear (RMN) de estado sólido (2), além de técnicas de calorimetria diferencial de varredura (DSC).Resultados:Observamos linearidades nas larguras de linha espectrais dos núcleos de 7Li e 133Cs em função da densidade iônica dos mesmos. (3) Para todas as razões Li-Cs, medimos comportamentos lineares, indicando que variações de qualquer um dos íons não afeta a diluição dos demais, indicativo da mistura aleatória dos íons, em conformidade com o RIDM.Outro parâmetro que poderia evidenciar a presença do EIM seria a apresentação de comportamentos não lineares na temperatura de vitrificação, no entanto a sensibilidade desse parâmetro é muito menor do que na condutividade, explicando os pequenos desvios observados.Conclusões:A perturbação do sistema Li-Cs metafosfato com Sr não alterou a diluição das espécies móveis, mantendo a aleatoriedade da mistura iônica, um forte indicio de que o EIM se manteve presente no sistema.Para confirmar mais claramente a existência do EIM em algumas séries, serão feitos experimentos de RMN de 7Li e 133Cs em baixa temperatura, abaixo de 200K, para eliminar os efeitos dinâmicos na determinação dos acoplamentos. Também se realizará experimentos de condutividade DC nesses metafosfatos afim de vincular as propriedades estruturais particulares dos álcalis com a magnitude do EIM observado em cada uma das séries com uma concentração fixa de SrO.Para confirmar mais claramente a existência do EIM em algumas séries, serão feitos experimentos de RMN de 7Li e 133Cs em baixa temperatura, abaixo de 200K, para eliminar os efeitos dinâmicos na determinação dos acoplamentos. Também se realizará experimentos de condutividade DC nesses metafosfatos afim de vincular as propriedades estruturais particulares dos álcalis com a magnitude do EIM observado em cada uma das séries com uma concentração fixa de SrO.

Palavras-chave: Efeito de íons mistos. Li-Cs-Sr metafosfato . Ressonância magnética nuclear de estado sólido.

Referências:

1 SWENSON, J.et al. /hrefhttps://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.63.132202Random ion distribution model: a structural approach to the mixed-alkali effect in glasses. **Physical Review B,** v. 63, n. 13,p.132202, 2001.

2 SLICHTER, C. P. **Principles of magnetic resonance**. Berlin: Springer-Verlag, 1990.

3 STEBBINS, J. F. /hrefhttps://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167273898002240Cation sites in mixed-alkali oxide glasses: correlations of NMR chemical shift data with site size and bond distance.**Solid State Ionic**, v. 112, n. 1-2, p. 137-141, 1998.

PG113

Análise evolutiva e estrutural de éxons pertencentes aos genes associados à diabetes Mellitus tipo 2

MOTA, D. M. D. [1]; de MARCO, R. [1]

diogomaciel@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Diabetes Mellitus é um grupo de doenças metabólicas caracterizadas por hiperglicemia derivada dos defeitos na secreção ou ação da insulina. Atualmente, encontram-se duas principais categorias de diabetes: tipo 1 e tipo 2. A diabetes tipo 2 está presente entre 90-95% dos casos da doença e consiste em uma combinação de resistência à ação, com uma resposta ineficiente a secreção da insulina. (1) Sua manifestação é dependente de alelos mutantes em múltiplos "loci"gênicos; no momento atual, há pelo menos 128 sinais distintos de associação a diabetes tipo 2 atribuídos a 113 "loci".(2). Devido a alta prevalência da diabetes tipo 2 argumenta-se que a maioria destas mutações devem ter possuído um caráter neutro ou positivo durante a evolução da espécie humana. Fundamentos indicam que as mutações em sequências exônicas e intrônicas podem ter efeitos inesperados no processo de splicing.(3) No entanto a determinação bioinformática é bastante difícil, visto que a identificação in silico de sequências de regulação de splicing é falha. Diante disso, no presente projeto, sugerimos uma análise alternativa baseada em um estudo evolutivo e estrutural de éxons adjacentes a mutações associadas à diabetes tipo 2 com o objetivo de obter evidências sobre possível tendência destas mutações localizarem-se, preferencialmente, ao lado de éxons dispensáveis, determinados a partir de diversos parâmetros. Tais análises baseiam-se na premissa que mutações tendem a ter um efeito local no padrão de splicing, as análises propostas abordarão aspectos independentes entre si, fornecendo parâmetros que permitirão avaliar nossa hipótese e apontar genes associados à diabetes preferenciais para futuros estudos de mudança de padrão de splicing.

Palavras-chave: Diabetes mellitus. Bioinformática. Splicing alternativo.

Referências:

1 AMERICAN DIABETES ASSOCIATION. Diagnosis and classification of diabetes Mellitus. **Diabetes Care**, v. 33, Suppl. 1, p. S62-S69, 2010. doi: 10.2337/dc10-s062.

2 SCOTT, R. A. et al. An expanded genome-wide association study of type 2 diabetes in Europeans. **Diabetes**, v. 66, n. 11, p. 2888-2902, 2017. doi: 10.2337/db16-1253.

3 SÉGUREL, L. et al. Positive selection of protective variants for type 2 diabetes from the Neolithic onward: a case study in Central Asia. **European Journal of Human Genetics**, v. 21, n. 10, p.1146-1151, 2013. doi: 10.1038/ejhg.2012.295.

PG114

Análise diferencial de CAZymes produzidas por Thielavia terrestris em biomassas pré-tratadas e in natura e caracterização heteróloga de enzimas com aplicações biotecnológicas

MULINARI, E. J. [1]; ZERBINI, M. V. [1]; MUNIZ, J. R. C. [1]; SEGATO, F. [2]; PRAde, R. [3]

evandro.mulinari@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Escola de Engenharia de Lorena - USP

[3]Oklahoma State University

As análises de espectrometria de massas (LC-MS/MS) do cultivo de *Thielavia terrestris* nas diferentes biomassas, permitiram a identificação de 136 proteínas com atividade em carboidrato (CAZymes). As biomassas analisadas e que serviram de única fonte de carbono para o desenvolvimento do fungo termofílico foram: bagaço de cana in natura após processo de moagem realizados nas usinas de cana de açúcar (SCBIN), bagaço de cana pré-tratado com explosão a vapor (SCBSE) e polpa Kraft de eucalipto branqueada (BEKP). As características dos três cultivos como: quantidade de proteínas, hidrólise, temperatura ótima e painel de substratos serviram como base para discussão das análises de secreção diferencial das CAZymes nos cultivos. A análise foi capaz de identificar as diferenças entre a secreção das principais proteínas produzidas pelo *T. terrestris*, compor um perfil característico de enzimas e agrupá-las de acordo com seu nível de secreção para cada tipo de cultivo. Mediante essas análises, o cultivo de SCBSE mostrou seu potencial para induzir certas celulases e enzimas auxiliares recrutadas para despolimerizar a fonte de carbono disponível, refletindo em sua atividade contra substratos celulósicos na mesma ordem que SCBIN. De modo geral, o perfil de CAZymes é bastante diversificado, chamando atenção o alto conteúdo de enzimas oxidativas identificadas: AA9, AA3, AA7, que parece estar relacionado com a natureza do microrganismo em captar substrato oxidado como alternativa à competição no meio natural.Com o estudo prévio do genoma e transcriptoma do Com o estudo prévio do genoma e transcriptoma do *T. terrestris*,(1) as enzimas identificadas com possíveis aplicações biotecnológicas foram selecionadas para clonagem heteróloga para posteriores caracterizações biofísicas e bioquímicas. Até o momento, uma arabinofuranosidase da família GH62 (TtGH62), uma lacase da família AA1 (TtLcc1) e uma xilanase da família GH10 (TtGH10) já foram clonadas e estão em fase de caracterização. A TtGH62 foi caracterizada em substrato sintético (pNPAraf) e polimérico (arabinano e arabinoxilano), apresentando temperatura e pH ótimos em pNPAraf de 25-35 °C e 4,5-5,0, e a estrutura tridimensional foi analisada através de difração de raios X, revelando um homodímero com domain swapping das blades do beta-propeller entre duas unidades.(2) A TtLcc1 apresentou pH ótimo em ABTS de 4, temperatura ótima de 55 °C e a análise dicroísmo circular do desenovelamento térmico apontou um Tm de 70 °C.

Palavras-chave: CAZy. Fungo termofílico. Biomassa.

Referências:

1 BERKA, R. M. et al. Comparative genomic analysis of the thermophilic biomass-degrading fungi Myceliophthora thermophila and *Thielavia terrestris*. **Nature Biotechnology**, v. 29, n. 10, p. 922-7, 2011. Disponível em: < http://dx.doi.org/10.1038/nbt.1976 >.Acesso em: 19 set. 2018.

2 CAMARGO, S.**Caracterização funcional e estrutural da primeira arabinofuranosidase da família 62 de *Thielavia terrestris* dimerizada através de *domain swapping*.** 2018. 101p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos,São Carlos,2018.

PG115

Caracterização estrutural e bioquímica de uma esterase halotolerante de Bacillus licheniformis

NAKAMURA, A. M. [1]; KAdoWAKI, M. A. S. [1]; GOdoY, A. S. [1]; NASCIMENTO, A. S. [1]; POLIKARPOV, I. [1]

aline.nakamura@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Esterases são biocatalisadores amplamente utilizados em processos industriais devido a sua versatilidade enquanto mantém alta régio- e enantioseletividade, não necessitam de co-fatores e são estáveis em diversos solventes orgânicos. (1) *Bacillus licheniformis* é um microrganismo frequentemente utilizado em diversos setores industriais e biotecnológicos, além de ser uma promissora fonte de esterases. (2) Apesar da relevância, nenhuma estrutura de carboxilesterase desse organismo foi registrada até o momento. Neste período de projeto avançamos com estudos estruturais, biofísicos e bioquímicos de uma carboxilesterase de *B. licheniformis*, *Bl*Est1. Esta enzima presentou atividade ótima a 40°C e pH 7,0 e mantém atividade residual de 40% após 72h de incubação a 40°C. Ensaios de especificidade contra substratos de diferentes tamanhos de cadeia ligados a p-nitrofenol mostraram que *Bl*Est1 é mais ativa contra p-nitrofenil acetato, um éster com cadeia de dois carbonos. Além disso, a enzima se mostrou estável na presença de metanol, isopropanol e butanol. Obtivemos um conjunto de dados de difração de raios X com 1,8 Å de resolução que revelou um domínio catalítico do tipo α hidrolase e um domínio adjacente ao sítio ativo formando um bolso exposto ao solvente onde o substrato é acomodado. Dessa maneira, a ligação de substratos de cadeia longa é energeticamente desfavorável e concorda com sua maior especificidade com substratos de cadeia curta. Por fim, *Bl*Est1 possui sua estabilidade aumentada consideravelmente na presença de altas concentrações de NaCl. Em 3 M NaCl, há um incremento de 17°C na temperatura de *melting* e uma retenção de aproximadamente 95% da atividade após incubação de 72 h a 40°C. Além disso, mantém atividade 0 a 5 M NaCl. Essas características classificam *Bl*Est1 como uma enzima halotolerante e sua habilidade em trabalhar em condições extremas faz dessa enzima uma interessante candidata a aplicações biotecnológicas.

Palavras-chave: Bacillus licheniformis. Halotolerância. Cristalografia.

Referências:

1 KAPOOR, M.; GUPTA, M. N. Lipase promiscuity and its biochemical applications. **Process Biochemistr**y, v. 47, n. 4, p. 555-569, 2012.

2 VEITH, B. et al. The complete genome sequence of *Bacillus licheniformis* DSM13, an organism with great industrial potential. **Journal of Molecular Microbiology and Biotechnology**, v. 7, n. 4, p. 204-211, 2004.

PG116

The mathematization of electrostatics in the 18th century: a historical-critical study

NARDI, L. M. C [1]; SILVA, C. C. [1]

lucas.nardi@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The role of the development of mathematics in the sciences of the 18th century has been a very interesting topic for the historians of science. However, most of the work done has a focus on the mathematization of mechanics. (1-2) Until Kleist's and Musschenbroek's results, dating from 1745/1746, that became known as the Leiden jar, most of the studies about electric phenomena were related to conduction, attraction and repulsion (with a focus on what materials could or could not be electrified and how could they be electrified). (3) There has not been much cover on how mathematics spread into electrostatics in the 18^{th} century. Taking this gap as our starting point this poster explores the way mathematics was entangled in the study of electrostatics of that period. Thus, we focus our attention to Franz Ulrich Theodosius Aepinus' (1724-1802) *opus magnum*, the *Tentamen Theoriae Electricitatis et Magnetismi*. His use of mathematics gives us analyses samples on how mathematics was applied into a pre-existing physical theory (Franklin's theory) and how mathematics (arithmetic and calculus) ended up being inseparable from physical reasoning. Also, we analyze how mathematics entangled itself with experimental interpretation of qualitative and quantitative data.

Palavras-chave: History of electricity. 18th century. Mathematization.

Referências:

1 GINGRAS, Y. What did Mathematics do to Physics? **History of Science**, v. 39, p. 383-416, 2001. doi: 10.1177/007327530103900401.

2 GREENBERG, J. L. Mathematical physics in eighteenth-century France. **Isis**, v. 77, n. 1, p. 59-78, 1986.

3 HEILBRON, J. L. **Electricity in the 17^{th} and 18^{th} centuries**: a study of early modern physics. Berkeley: University of California Press, 1979.

PG117

Desenvolvimento de dispositivos para o monitoramento da bactéria F. nucleatum e mutações genéticas para a detecção precoce de câncer colorretal

NASCIMENTO, G. F. [1]; MATERON, E. M .[2]; FARIA, R.C. [1]; OLIVEIRA J., O. N. [1]

gustavo.nascimento@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Departamento de Quimica - UFSCAR

O desenvolvimento de metodologias para diagnóstico de câncer tornou-se uma das prioridades atualmente, devido ao alto índice de incidência e mortalidade, sendo estimado 1,7 milhões de novos casos em 2018 e mais de 8,1 milhões de mortes em 2012 (1). O desenvolvimento de métodos para diagnóstico precoce de câncer colorretal (CCR) é relevante, por ser este tipo de câncer o terceiro em número de mortes no mundo. (2) Nesse projeto pretende-se desenvolver biossensores eletroquímicos para detectar mutações no DNA relacionadas com o CCR, além da bactéria *Fusobacterium nucleatum* (*F. nucleatum*), um microrganismo cuja forte relação com o CCR foi descoberta recentemente. (3). Dispositivos microfluídicos descartáveis baseados em eletrodos impressos de carbono foram desenvolvidos utilizando-se uma impressora de corte para a fabricação dos moldes e dos canais microfluídicos. Esta abordagem permitiu a fabricação simples e rápida de dispositivos económicos utilizando como substrato tereftalato de poliestireno (PET, do inglês *polystyrene terephthalate*). Os dispositivos apresentaram boa reprodutibilidade com RSD = 7,3%, determinado a partir de estudos de voltametria cíclica com a sonda eletroquímica $Fe(CN)_6^{-3/-4}$. Em uma primeira tentativa, sequencias para o reconhecimento especifico do DNA da bactéria *F. nucleatum* foram imobilizadas covalentemente nas superfícies dos eletrodos de trabalho dos dispositivos microfluídicos e a interação com diferentes concentrações do cDNA foi estudada partir de medidas de Espectroscopia de Impedância Eletroquímica (EIS). O dispositivo proposto é promissor para a detecção de biomarcadores de CCR, sendo capaz de detectar baixas concentrações do DNA da bacteria *F. nucleatum* na faixa de concentrações de 0.6 nmol L^{-1} a 1000 nmol L^{-1}. Como trabalho paralelo, está sendo desenvolvido um sensor eletroquímico para detecção do fármaco antitumoral 5-Fluouracil (5 - FU), uma vez que sua concentração no soro sanguíneo deve ser continuamente monitorada a fim de evitar efeitos colaterais graves e deste modo, melhorar a eficácia do tratamento do câncer. O dispositivo baseado também em eletrodos impressos de carbono apresentou excelente correlação quando comparado com dispositivos comerciais, com sensibilidade igual à 2,2 $\times$ 10^{-3} μ A μ mol L^{-1} e limite de detecção igual à 7,5 μ mol L^{-1}. O dispositivo proposto também foi capaz de detectar 5-FU na presença de altas concentrações do fármaco Metotrexato, sem interferência significativa entre esses fármacos utilizados em combinação para tratamento de diferentes tipos de câncer incluindo-se CCR. Finalmente, a concentração de 5-FU foi medida em amostras enriquecidas de soro sintético com porcentagens de recuperação entre 103% a 119%.

Palavras-chave: Câncer. Eletroquímica. Quimioterapia. Eletrodos impressos.

Referências:

1 NATIONAL CANCER INSTITUTE. **Cancer statistics**. Disponível em: <https://www.cancer.gov/about-cancer/understanding/statistics>. Acesso em: 02 set. 2018

2 LIM, J. M.et al. Electrochemical peptide sensor for diagnosing adenoma-carcinoma transition in colon cancer. **Biosensors and Bioelectronics**, v.98, p.330–337,2017.doi: 10.1016/j.bios.2017.07.013.

3 BULLMAN, S. et al. Analysis of fusobacterium persistence and antibiotic response in colorectal cancer. **Science**, v. 358, n. 6369, p. 1443-1448, 2017.

PG118
Teoria de lasers de Hamiltonianos efetivos

OLIVEIRA NETO, F. [1]
foliveiraneto@usp.br
MOUSSA, M. H. Y. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A teoria do laser foi proposta há muitos anos, (1) sendo responsável por várias outras conquistas científicas, mas ainda hoje conta com diversos estudos e aplicações nas mais distintas áreas, como medicina e engenharia. Nesta monografia fazemos um breve apanhado sobre a teoria do laser e também formulamos uma metodologia, fazendo uso da técnica de isomorfismo, que nos permite reobter, para outros sistemas com diferentes interações, a mesma equação mestra do laser tradicional, cuja solução já conhecemos como sendo o estado coerente, a fim de obtermos lasers cujos estados de radiação eletromagnética sejam outros além deste; estado comprimido e estados de gato para a radiação. Também mostramos como fazer uso da engenharia de Hamiltoniano (2) para construir um esquema de níveis que nos leva aos Hamiltonianos que fornecem os lasers com os estados de radiação citados anteriormente. Fazemos um trabalho de caracterização dos estados obtidos, como investigar o comportamento das quadraturas e as representações no espaço de fase, a fim de exibir como a compressão do estado se dá em termos da nossa engenharia de hamiltoniano construída, e também ilustramos os diferentes estados de gato formados a partir do estado obtido. Ainda iniciamos um outro passo fazendo uma engenharia de um Hamiltoniano não Hermitiano, impondo a simetria de reflexão espaço-temporal, que nos abre caminho para uma nova mecânica. (3)

Palavras-chave: Teoria do laser. Engenharia de Hamiltoniano. Engenharia de reservatório. Mecânica quântica com simetria PT.

Referências:

1 SCULLY, M. O.; LAMB, W. E. Quantum theory of an optical maser. I. general theory. **Physical Review**, v. 159, n. 2, p. 208-226, 1967

2 POYATOS, J. F.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 23, p. 4728-4731, 1996

3 BENDER, C. M. Introduction to PT-symmetric quantum theory. **Contemporary Physics**, v. 46, n. 4, p. 277-292, 2005.

PG119

Modelo simples para acoplamentos anômalos do Higgs e dados do LHC

daS NEVES, G. A.[1]; BOITO, D. R.[1]

abo.gneves@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A descoberta do Bóson de Higgs, em 2012, com uma massa de aproximadamente 125 GeV, trouxe a peça que faltava para o Modelo Padrão (SM).(1) O estabelecimento preciso de seus parâmetros e interações, portanto, é de extrema importância para a confimração da teoria. Neste trabalho, estudamos as interações do Bóson de Higgs com as demais partículas do SM usando dados do signal strengths medidos pelos experimentos CMS e ATLAS do CERN-LHC.(2) Utilizando o "método dos kappas", no qual multiplicamos o acoplamento de uma partícula i do SM com o bóson de Higgs, g_i^{SM}, por uma constante κ_i (3), analisamos estatísticamente, através de uma abordagem frequentista, contextos que possam sugerir acoplamentos anômalos ao SM, com o intuito de procurar indícios de física Além do Modelo Padrão (BSM). Estudamos três cenários distintos, começando com acoplamentos individuais (κ_t, κ_b, κ_τ, κ_V, κ_γ e κ_{gg}), um a um, e depois em um ajjuste com todos esses acoplamentos livres; parametrizamos acoplamentos com férmions, sem discriminar os diferentes sabores, juntamente à parametrização com bósons vetoriais (κ_F e κ_V); e, por fim, parametrizamos acoplamentos efetivos com fótons e glúons (κ_γ e κ_g), i.e., sem se preocupar com a estrutura interna dos diagramas de Feynman envolvidos. Em todos os casos nossos resultados são compatíveis com as previsões do SM em uma faixa de, no máximo 1.5σe , portanto, nenhum indício de nova física foi encontrado.

Palavras-chave: LHC. Bóson de Higs. Modelo padrão.

Referências:

1 DJOUADI, A. The anatomy of electro-weak symmetry breaking I: the higgs Boson in the standard model. **Physics Reports,** v. 457, n. 1-4,p.1-126, 2008. doi:10.1016/j.physrep.2007.10.004.

2 DJOUADI, A. **Higgs physics**. 2015. Disponivel em: <arXiv preprint arXiv:1505.01059>. Acesso em: 10 set. 2018.

3 BUCHALLA, G.et al. Fitting higgs data with nonlinear effective theory. **European Physical Journal C**, v. 76, n. 5, p. 233, 2016.

PG120

Diagnóstico de doenças em citros por meio de DeepLearn combinado a imagens de espectroscopia de fluorescência

NEVES, R. F. de O.[1]; WETTERICH, B.[1]; PARROS, E.[1]; SOUSA, M. de [1]

rfo.neves@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Criar um modelo computacional (1) capaz de diferenciar e diagnosticar de maneira precisa doenças que acometem plantas produtoras de citros, utilizando imagens obtidas por meio de espectroscopia de fluorescência (2) de folhas sintomáticas. Neste trabalho são analisadas as doenças Cancro Cítrico, Greening, Verrugose e Deficiência de Zinco (2). A partir de um conjunto de LEDs de alta potência (405nm), utilizado para realizar a excitação das amostras, combinado a um filtro passa banda (690nm) (2), foram coletadas imagens de 100 amostras de folhas sintomáticas de cada uma das doenças analisadas. As imagens foram submetidas a um algoritmo de DeepLearn baseado em redes neurais convolucionais e conceitos de TransferLearning (3), sendo 90% delas utilizadas para treinamento e 10% para teste. A configuração ideal de pesos da rede foi obtida por meio de técnicas de busca exaustiva. Os experimentos iniciais, realizados com os parâmetros ideais das redes neurais convolucionais, resultaram em 95% de precisão na identificação das doenças, superando resultados de trabalhos anteriores que não atingiam os 80% de precisão.

Palavras-chave: Deeplearn. Espectroscopia de fluorescência. Redes neurais.

Referências:

1 NISBET, R.;MINER, G.; ELDER IV, J. **Handbook of statistical analysis and data mining applications**.New York: Academic Press, 2009.

2 WETTERICH, C. B.et al. Detection of Huanglongbing in Florida using fluorescence imaging spectroscopy and machine-learning methods. **Applied Optics**, v. 56, n.1, p.15-23,2017.

3 CHOLLET, F. et al. **Keras-team/Keras.** Disponivel em:< https://github.com/fchollet>. Acesso em: 05 set. 2018. https://github.com/fchollet>. Acesso em: 05 set. 2018.

PG121

Simulações de Monte Carlo para o cálculo de energia livre de ligação em sistemas biológicos

NOGUEIRA, V. H. R. [1]; NASCIMENTO, A. S. [1]

victor.nogueira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Os sistemas biológicos macromoleculares são conhecidos por serem sistemas interagentes. Essas interações são fundamentais para processos como comunicação celular, especificidade de reações enzimáticas e regulação da expressão gênica. Sendo assim, o estudo das afinidades envolvidas nas interações biomoleculares se faz necessário a fim de se alcançar novos progressos em biotecnologia, especialmente na área de desenvolvimento de fármacos. (1) A energia livre de ligação, δG_{lig}, é provavelmente a grandeza termodinâmica mais importante que está associada à medida da afinidade nas interações biomoleculares e os métodos disponíveis atualmente para estimar essa grandeza podem ser divididos, basicamente, em dois grupos: métodos rápidos, mas que carecem de bases termodinâmicas sólidas e estimam a energia livre de ligação através de aproximações; e os métodos que são mais caros e são baseados em ensembles de Dinâmica Molecular (DM) para calcular as energias livres de ligação de maneira mais rigorosa, porém, com custo computacional mais elevado. O objetivo deste trabalho foi aprimorar e validar de um método menos custoso para o cálculo da energia livre de ligação. Para isso, simulações de Monte Carlo (MC) da dinâmica dos ligantes dentro do sítio de ligação são usadas para gerar ensembles termodinâmicos. (2) Depois disso, as energias livres de ligação são calculadas usando uma combinação de energias e entropias estimadas através de uma estratégia de aproximação de primeira ordem. (3) O algoritmo que realiza esse cálculo inclui uma translação e uma rotação randômicas do ligante dentro do sítio de ligação, seguida por uma mudança também randômica nos ângulos de torção envolvendo átomos pesados. Comparações entre as energias livres de ligação calculadas com baixo custo computacional e as experimentais disponíveis na literatura para o sistema modelo utilizado, lisozima do vírus T4, mostraram uma correlação razoável, com r=0,75. Esses dados também apresentaram resultados interessantes quando comparados com outras metodologias, tais como LIE, MM-PBSA e MM-GBSA. Assim, a abordagem utilizada para a determinação das energias combinando ensembles de Monte Carlo para energias médias e a estimativa da entropia pela aproximação de primeira ordem mostrou-se eficiente em termos de tempo computacional e para comparação com dados de energia livre de ligação determinados experimentalmente.

Palavras-chave: Monte Carlo. Energia livre de ligação. Interações moleculares.

Referências:

1 NELSON, D. L.; COX, M. M. **Princípios de bioquímica de Lehninger**. 5. ed. Porto Alegre: Artmed, 2010.

2 LEACH, A. R. **Molecular modelling**: principles and applications. New York: Prentice Hall, 2001.

3 KILLIAN, B. J.; KRAVITZ, Y. J.; GILSON, M. K. Extraction of configurational entropy from molecular simulations via an expansion approximation. **Journal of Chemical Physics**, v. 127, n. 2, p. 024107, 2007.

PG122

Growth of High-TC cuprate superconductor by pulsed laser deposition

MORGAdo, F. F. [1-3]; SANTOS, P. C. S. [2-3]; MORI, T. J. A. [3]; SCHIO, P. [3]; CEZAR, J. C. [3]

ferraz.f@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Intituto de Física Gleb Wataghin - Unicamp

[3]Laboratório Nacional de Luz Síncrotron/LNLS - CNPEM

The phase diagrams of complex oxides are very diverse due to the strong interaction between electrons in the electronic structure, named as electronic correlations. Among other mechanisms, the interactions can be explained by the electrons repelling each other by Coulomb's Law and by Fermi repulsion (Fermi hole) with electrons of same spin. It is possible to probe those interactions by changing electrostatically the carrier density, the main concept behind the field-effect transistors (FET) which is the building blocks of nanoelectronics devices. Basically, in these transistors, it is applied a voltage across a dielectric gate to control the carrier density in the channel between the other two contacts (drain and source). Consequently, the conductivity of the channel is changed as function of the gate voltage. In the case of a strongly correlated oxide channel, it is possible to change the conductivity and the ground state of the material. For example, consider the high-T_CTC copper oxide $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, it is possible through an electric field to switch between superconducting and insulator phases. (1) In this poster we present the proposal and the results of our master work, which deals with the growth by pulsed laser deposition (PLD) of a layered perovskite superconductor. In our case, we aim to find the optimal deposition conditions for the growth of a single layer of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ on $SrTiO_3$ substrates. In that case, we studied the characteristics of the superconductor in order to use it within a field effect device to tune its electrical properties. In other words, we would be able to control the critical temperature of the superconductor using an electric potential. This project intends to illustrate its proposal by means of preliminary results acquired using several techniques such as X-ray diffraction (XRD), atomic force microscope (AFM), X-ray photoemission spectroscopy (XPS) and transport measurements (superconductivity) of the single layer above mentioned.

Palavras-chave: HIgh-TC copper oxide superconductor. YBCO. STO. Thin film. Pulsed laser deposition.

Referências:

1 MARTIN, L. W.; CHU, Y.-H.; RAMESH, R. Advances in the growth and characterization of magnetic, ferroelectric, and multiferroic oxide thin films. **Materials Science and Engineering**, v. 68, n. 4-6, p. 89-133, May 2010.

PG123

Descontaminação de fluidos circulantes com ultra-violeta aplicados em alimentos

OLIVEIRA, B. P. de [1]; BLANCO, K. C.[1]; BAGNATO, V. S.[1]

b.p.oliveira@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Technological development has greatly evolved in the last 10 years, producing new materials and instrumentations to be applied in many vital areas like health and food. Such areas are of great interest around the world. However the interface human-microbiology is a problem because the procedure for decontamination and control of the microorganism do not increase likewise the development of technology. (1) Currently, there are some method for this control, a thermal and a chemical mechanisms. The heat treatments have limitations in industrial processes and non-thermal resistance materials. Chemical treatments have a problem with application in food process because it create an environment problem and accumulation in food. (2) Alternatively to thermal and chemical control, light can be direct applied in the manufacture processes in food industry or medical procedures for example transplants, hemodialysis.(3) Both situations have the same problem, which is the contact of the circulating fluids and non-control microbiological agents with instruments that could lead to hazardous contamination. In this research, the focus is the constructions of equipment addressing such problems for the health and food industries. Decontamination processes will be carried out by applying UV-light in order to reduce microbiological agents to the security range.

Palavras-chave: Decontaminatin. UV.

Referências:

1 FRAUNHOFER INSTITUTE FOR PRODUCTION TECHNOLOGY. IPT. **Industry 4.0 - Connected, adaptive production**.2016.Disponivel em:</hrefhttp://www.ipt.fraunhofer.de/en/trends/industry40.htmlhttp://www.ipt.fraunhofer.de/en/trends/ind em: 04 set. 2018.

2 GAYAN, E.; CONDON, S.; ÁLVAREZ, I.Biological aspects in food preservation by ultraviole light: a review. **Food and Bioprocess Technology**, v. **7**, n.1, p.1-20,2014.

3 SELTSAM, A.; MULLER, T. H. UVC irradiation for Phatogen reduction of Platelet concentrates and plasma. **Transfusion Medicine and Hemotherapy, v. 38**,n.1,p. 43-54, 2011.

PG124

Computational approach to simulate NMR data from fluid molecules diffusing in porous media

LUCAS-OLIVEIRA, E. [1]; ARAUJO-FERREIRA, A G. [1]; BONAGAMBA, T. [1]

everton.lucas.oliveira@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

NMR techniques are routinely applied for the study of molecular fluid dynamics in porous media. Consequently, it is fundamental to correlate the NMR experimental data with the three-dimensional morphology of these materials, such as, pore sizes, tortuosity, and permeability. (1-3) The theoretical comprehension of the molecular dynamics in confined porous media, from the NMR point of view, is restricted to some very specific boundary conditions. (1) Under more complex boundary conditions, such as real porous media, computational physics methods are required. (2) In order to simulate NMR data for fluid molecules migrating in porous media, it is necessary to have precise information about its three-dimensional morphology, which is obtained by 3D X-Ray Microtomography (microCT). The microCT data is called Digital Porous Media (DPM). NMR Simulations are based on a Random Walk method that describes the dynamics of the water molecules migrating along the DPM. The NMR data takes into account the interactions of the nuclear spins with the pore walls and among themselves. One of the most important parameters estimated from these simulations are the surface relaxivities $r_{1,2}$, defined by $1/T_{1,2} = r_{1,2}(S/V)$, in which S/V is the pore surface-to-volume ratio and $r_{1,2}$ are the surface relaxivities associated to the longitudinal and transverse relaxations. (3) The simulated results for T_2 distributions and T_1xT_2 correlation maps are in good agreement with the experimental NMR data and theoretical models, which indicates the potential of computational physics models for the analyses of NMR data in complex porous materials.

Palavras-chave: NMR. Surface relaxivity. DIgital porous media.

Referências:

1 BROWNSTEIN, K. R.; TARR, C. Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells. **Physical Review A**, v. 19, n. 6, p. 2446-2453, 1979.

2 BERGMAN, D. J. et al. Self-diffusion in a periodic porous medium: a comparison of different approaches. **Physical Review E**, v. 51, n. 4, 3393-3400, Apr. 1995.

3 LUCAS-OLIVEIRA, E. et al. Computational approach to integrate 3D X-ray microtomography and NMR data. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 292, p. 16-24, July 2018. doi: 10.1016/j.jmr.2018.05.001.

PG125
Uma investigação em teoria de grupos

OLIVEIRA, C. E. [1]
caio.estevao@usp.br
SIPAHI, G. M. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Do ponto de vista matemático, a teoria de grupos nos permite analisar de forma detalhada um dado conjunto de operações de simetria que formam um grupo entre si (1), podemos então entender a teoria de grupos poucas palavras como a matemática da simetria. Vale ressaltar que há diversas aplicações para ela em física moderna . A aplicação de interesse deste poster está em utilizar tal ferramentário como poderoso método de resolução de problemas quânticos (2), conforme mostrado por E. Wigner em 1926 através da aplicação da teoria de grupos a fim de de analisar espectros atômicos . Outro resultado que corrobora com seu uso para tais investigações é o trabalho de H. Bethe (3) em 1929, o qual ele aplica a teoria de grupos para compreender estruturas eletrônicas de moléculas e cristais permitindo assim descrever de forma precisa degenrescências de energia e prever quais elementos de interação serão nulos. Portanto podemos estabelecer uma relação direta entre a descrição dos níveis de energia e a simetria do sistema, a qual é refletida diretamente na construção da Hamiltoniana. (1-2) Esse trabalho consiste em uma breve discussão de conceitos de teoria de grupos e suas respectivas aplicações em sistemas físicos os quais a simetria é bem definida.

Palavras-chave: Mecânica quântica. Teoria de grupos.

Referências:

1 INUI, T.; TANABE, Y.; ONODERA, Y. **Group theory and its applications in physics**. Berlin: Springer, 1990. (Springer series in solid-state sciences, v. 78).

2 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. **Group theory application to the physics of condensed matter**. Berlin: Springer, 2008

3 BETHE, H. A. Splitting of terms in crystals. **Annalen der Physik,** v. 3, p. 133-206, 1929.

PG126

Triagem de fragmentos para a proteína NS5 RNA polimerase dependente de RNA, um alvo farmacológico deZika vírus

OLIVEIRA, K. I. Z. [1]; MESQUITA, N. C. M. R. [1]; ZUNIGA, G. A. L. [2]; GOdoY, A. S. [1]; DIAS, M. V. B. [2]; OLIVA, G. [1]

ketzagato@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Biológicas - USP

O Zika vírus (ZIKV) pertence à família *Flaviridae* e ficou conhecido por causar a Febre Zika (FZ), cujo principal vetor de transmissão é o mosquito *Aedes aegypti.* Dentre dezembro de 2015 a maio de 2018, mais de 200.000 casos de FZ foram confirmados em território brasileiro. Além de causar sintomas similares aos da Dengue, a FZ foi relacionada ao aumento dos casos de microcefalia em recém-nascidos cujas mães tiveram infecções durante a gestação e a outros problemas de neurológicos, motores, de visão e/ou cardíacos desenvolvidos observados tardiamente após o nascimento. Esse conjunto de sintomas foi nomeado de Síndrome Congênita do Zika vírus.(1) O ZIKV possui um genoma de RNA positivo traduzido numa única poliproteína e clivado posteriormente em três proteínas estruturais e sete proteínas não estruturais (NS). A proteína NS5 do ZIKV possui dois domínios, um Metil-transferase envolvido na metilação da estrutura 5'-cap do genoma do RNA e outro RNA polimerase dependente de RNA (RdRp), responsável pela polimerização de RNA necessário para a replicação de RNA viral possuindo funções essenciais para a repllicação viral o que a torna um relevante alvo farmacológico. (2) Nesse contexto, nosso objetivo, após ter determinado a estrutura cristalográfica da proteína NS5 do domínio RdRp (3), tem sido a busca por ligantes, putativos inibidores. Para isso realizamos triagem com a biblioteca de fragmentos e compostos disponível no Laboratório de Biologia Estrutural do Instituto de Ciências Biológicas da USP, cedida pelo Prof. Dr. Marcio Dias. Para efetuar a triagem utilizou-se o ensaio que monitora a desnaturação térmica de proteínas conhecido por Fluorimetria de Varredura Diferencial *(DSF-Differential Scanning Fluorimetry),* frente a biblioteca composta por 507 fragmentos e compostos. Esta metodologia biofísica faz uso do parâmetro de fluorescência do Sypro© Orange (Sigma-Aldrich), no qual as amostras são submetidas a aquecimento em um equipamento de PCR (Biorad), com taxa de aumentando 1ºC/min. Os testes foram realizados em triplicata. A temperatura média de desnaturação (T_m) da proteína nativa obtida foi 44,6 $\pm$ 0,2 ºC,. De todos os compostos testados, obtivemos 143 *hits.* Destes 49 são fragmentos e 94 são compostos maiores. Devido ao grande número de compostos, estes foram agrupados por similaridade de suas estruturas químicas. Observou-se a presença de 14 diferentes grupos, dos quais 7 possuem como núcleo químico principal um anel triazol, 3 um anel tiodiazol e 4 um núcleo derivado de 2,3-dihydronaphtho[1,2-b]furano-4,5-diona, ligados a átomos de nitrogênio ou enxofre. Assim, podemos inferir que a presença de nitrogênio é importante para a estabilização da proteína uma vez que a mesma faz o uso de bases nitrogenadas para a sua atividade polimerase. Após a triagem *in vitro* utilizando a técnica de DSF e a biblioteca *de* fragmentos e compostos, conseguimos selecionar alguns *hits*, que passarão por ensaios de termoforese e atividade enzimática para validar sua capacidade de ligação e influência dos mesmos na função polimerase da proteína. Estes compostos também serão submetidos a docagem molecular, difusão em cristais (*soaking*) e co-cristalização, com a finalidade de confirmar sua forma de interação com a proteína.

Palavras-chave: ZIKV. NS5. RdRp.

Referências:

1 VOGEL, G. Experts fear Zika's effects may be even worse than thought. **Science**, v. 352, n. 6292, p. 1375-1376, 2016.

2 YOKOKAWA, F. et al. Discovery of potent non-nucleoside inhibitors of Dengue viral RNA- dependent RNA polymerase from a fragment hit using structure-based drug design. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 59, n. 8, p. 3935-3952, 2016.

3 GODOY, A. S. et al. Crystal structure of Zika virus NS5 RNA-dependent RNA polymerase. **Nature Communications**, v. 8, p. 14764-1-14764-6, 2017. doi: 10.1038/ncomms14764.

PG127

Phototherapy applied to cellulose and chitosan hydrogels in Tissue engineering

ONO, B. A. [1]

bruno.ono@usp.br

GUIMARÃES, F. E. G. [1]
SCOTT, J. [2]
SHARMA, R. [2]
JOHN, M. [2]
COURTENAY, J. C. [2]
JOHNS, M. A. [2]
DOS SANTOS, D. M. [3]
CAMPANA FILHO, S. P. [3]
BUKZEM, A. L. [3]

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]University of Bath - Reino Unido

[3]Instituto de Química de São Carlos - USP

We are developing a low-cost scaffold of cellulose and chitosan for cell growth, which has antibacterial properties and do not use growth factors. (1) The quaternized chitosan with different linear density of positive charge and molecular weight is being searched and synthetized to help the interaction with the cells. (2) Additionally, the opportunity to integrate the fields of Tissue Engineering and Phototherapy to promote synergistically the cell adhesion are been evaluated for using different wavelengths and fluences. This research is being carried out through national and international collaboration with researchers of University of Bath and São Carlos Institute of Chemistry. The first part of the project was to develop and characterize the material. The project is going to initiate the stage of drawing different patterns above the hydrogel to direct the cell growth at the surface material and developing tridimensional scaffolds to grow more complexity tissues and apply the phototherapy to observe the biological response. (3) The first stage of the project was developed at the University of Bath, which gave a researcher scholarship for the first semester of 2017, and the analyses and techniques to hydrogel development were made through FT-IR, Confocal Microcopy, Fluorescence Microscopy and RMN. The preliminary results indicate a chitosan with 40% and 8% Degree of quaternization and a molecular weight around 400 and 900 kg/mol. The higher cell attachment (near to 60%), low cytotoxicity and high cell spreading (median circularity of 0.2) was observed for the higher DQ similar to tissue culture plate. The gram-negative bacteria (E. coli) had the more damage at higher DQ material casted, however the same material presented the higher number of E. coli attach to it. These results have a high potential at the development of Tissue Engineering using natural sources of low cost and high technologic impact.

Palavras-chave: Hydrogel. Chitosan. Cellulose. Tissue engineering. Phototherapy.

Referências:

1 COURTENAY, J. C. et al. Surface modified cellulose scaffolds for tissue engineering. **Cellulose**, v. 24, n. 1, p. 253–267, 2017

2 SANTOS, D. M. DOS; BUKZEM, A. DE L.; CAMPANA-FILHO, S. P. Response surface methodology applied to the study of the microwave-assisted synthesis of quaternized chitosan. **Carbohydrate Polymers**, v. 138, p. 317–326, 2016. doi: 10.1016/j.carbpol.2015.11.056.

3 PREECE, D. et al. Red light improves spermatozoa motility and does not induce oxidative DNA

damage. **Scientific Reports**, v. 7, p. 46480, 2017. doi: 10.1038/srep46480.

PG128

Continuous loading of ultracold ground state molecules in a dipole trap using a single light beam

PASSAGEM, H. F.[1]; COLIN-RODRIGUES, R.[1]; TALLANT,J. [1]; MARCASSA, L. G.[1]

henry.passagem@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

We have developed an approach to continuously load ultracold Rb_2 vibrational ground state molecules into a crossed optical dipole trap from a magneto-optical trap from a magneto-optical trap. The technique relies on a single high-power light beam with a broad spectrum superimposed onto a narrow peak at an energy of about 9400 cm^{-1}. This single laser source perform all the required steps, namely the photoassociation (1), vibrational cooling (2) and optical trapping of molecules. The lifetime of te ultracold molecules in the optical dipole trap is limited by off-resonant light scattering to about 80 ms. The proposed technique may open perspectives for the formation of the new molecular species in the ultracold domain, which are not yet accessible by well-established approaches.

Palavras-chave: Ultracold molecules. Photoassociation. Vibrational colloing. Dipole trap.

Referências:

1 PASSAGEM,H. F. et al.Formation of ultracold molecules induced by a high-power single-frequency fiber laser. **Journal Phyics B**, v. 50,n.4, p.045202,2017.

2 VITEAU, M. et al. Optical pumping and vibrational cooling of molecules. **Science**, v. 321, n.5886, p.232-234, p. 2008.

PG129

Transition from localized to extended states below the Fermi level in GaAs/AlGaAs multiple quantum well heterostructures

TITO, M. A. [1]; PUSEP, Y. A. [1]

anton_2080@hotmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The subject of metal-to-insulator transition (MIT) came to a renewed focus in the last decade due to recent new achievements: evidences of a complex structure around the MIT giving rise to strongly inhomogeneous states and to several intermediate phases (1), understanding of a deep significance of the strong correlations physics and a progress in understanding of the MIT in a frame of a concept of quantum phase transition. (2) In this work we report on the study of a transition from localized to extended electron states below the Fermi level in the multiple narrow quantum well (QW) GaAs/AlGaAs heterostructures, where disorder was generated by interface roughness. Decreasing the QW width enhances disorder due to interface roughness and results in the localized-to-extended states transition. Such a transition resembles the MIT profoundly investigated by electric transport measurements. However the studied here phenomenon takes place below the Fermi level at a fixed electron concentration which implies unchanging Coulomb correlations. The time-resolved photoluminescence was used to determine the energy of the mobility edge separating the localized and extended electron states. As expected, the mobility edge was found below/above the Fermi level in the metallic/insulating regime. Similar to the MIT, the localized-to-extended states transition manifests itself in a characteristic performance observed with the temperature and the magnetic field changes. In the metallic regime the studied transition was shown to be independent of the temperature and the predicted magnetic field induced shift of the mobility edge to a high energy range was observed. In the insulating regime the thermal activation gives rise to a drastic increase of the recombination rate. Moreover, the magnetic field induced reduction of the spatial overlap of the localized electron wave functions results in an additional relaxation of the momentum conservation rule which considerably enhanced the recombination rate. Thus, time-resolved photoluminescence measurements provide new insights into the evolution of the localized electron states below the Fermi level, inaccessible by electric transport measurements.

Palavras-chave: Mobility edge. Heterostructures. Photoluminescence.

Referências:

1 MIRANDA, E.; DOBROSAVLJEVIĆ, V. Disorder-driven non-Fermi liquid behaviour of correlated electrons. **Reports on Progress in Physics**, v. 68, n. 10, p. 2337, 2005.

2 SACHGDEV, S. **Quantum phase transitions**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

PG130

Assessing new biogenicity criteria of microfossils with a novel 3D imaging approach

MALdaNIS, L.[1-2]; GALANTE, D.[2]; BERTRAND, L.[3]

laramcp@usp.br

[1]Instituto de Fisica de São Carlos - USP

[2]Laboratorio Nacional de Luz Sincronton - Campinas

[3]IPANEMA. CNRS. Ministère de la Culture, UVSQ, USR3461. Université Paris-Saclay, France

Microfossils are morphological biosignatures of microorganisms preserved in the geological record and comprise the oldest direct record of life on Earth. However, due to the high level of geological processing over billions of years, the micrometric size and the chemical composition (highly dense and homogeneous rocks), the study of such structures has been limited, and many questions about their morphology, preservation and specially biogenicity remain unsolved. The use of nanometric resolution imaging techniques based on different physical phenomena has been proposed as a potential approach to overcome these limitations, exploring both the morphology and chemical composition of the samples, preferably in a non-destructive way.Here we present a novel non-destructive approach applying Synchrotron X-Rays 3D Ptychography (1) to investigate the ultrastructure of microfossils and putative morphological biosignatures with 3D nanometric resolution. We analyzed a set of Precambrian undisputed microfossils and putative ones of different morphologies and states of preservation. Our results provide novel features of the 3D preserved ultrastructure of these specimens and adds significant contribution to the debate of the biogenicity criteria for morphological biosignatures, presenting a novel approach to resolve putative terrestrial biogenic structures, as well as from meteorites and near-future sample return missions.

Palavras-chave: Ptychography. Microfossils. Biogenicity.

Referências:

1 DIEROLF, M. et. al.Ptychographic X- ray computed tomography at the nanoscale.**Nature**,v.467, p. 436,2010.doi:10.1038/nature09419.

PG131

Identificação de minerais por meio de Redes Neurais Artificiais

QUEIROZ, A. A. A. E. de [1]
alfredo.queiroz@usp.br
ANDRADE, M. B. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O supergrupo do pirocloro apresenta grande importância nas indústrias eletrônica, mecânica, nuclear e aeroespacial com o uso recorrente dos elementos químicos nióbio e tântalo, extraídos dos minerais dos grupos pirocloro e microlita, respectivamente. O Brasil é possuidor das maiores reservas de nióbio do planeta. A completa caracterização e identificação de minerais no Brasil ainda precisa ser ampliada, principalmente quando comparadas com a desenvolvida em outros países e também com relação a grande quantidade de reservas minerais no país. Atualmente, cerca de 70 espécies brasileiras foram aceitas pela Associação Mineralógica Internacional (IMA). Dentro deste panorama, a espectroscopia Raman apresenta-se como uma excelente ferramenta para a caracterização mineralógica, uma vez que não é necessária uma preparação muito elaborada da amostra e a análise não é destrutiva. (1) A aquisição dos espectros pode ser feita em tempo reduzido quando comparado com demais técnicas e é possível trabalhar com amostras de pequeno tamanho (na ordem de micrômetros). Ao associar esta espectroscopia com as bases de dados mineralógica, a agilidade de identificação é intensificada. Este projeto busca produzir uma ferramenta para identificar os padrões presentes nos espectros Raman e sua correspondência em base de dados, utilizando para isso as redes neurais artificiais (RNA) para reconhecer informações e gerar respostas conforme a teoria de aprendizagem cognitiva. (2) Nos processos iniciais de aprendizagem é necessário ter medidas confiáveis com relação as suas identificações (identificações incertas podem gerar um reconhecimento de padrões inconsistente), para tanto foi selecionado uma determinada quantidade de amostras, pertencentes ao grupo do pirocloro e microlita, e realizadas medições de difração de raios-X, microssonda eletrônica e espectroscopia Raman (esta como foco principal do trabalho e também foi observado como é possível retirar o ruído do sinal dessas amostras). Com essas medidas, é possível confirmar a identificação do mineral por mais de uma técnica.

Palavras-chave: Minerais. Redes neurais artificiais. Raman.

Referências:

1 GRIFFITH, W. P. Raman spectroscopy of minerals. **Nature**, v. 224, n. 5216, p. 264-266, 1969.

2 DUCH, W.; DIERCKSEN G. H. F. Neural networks as tools to solve problems in physics and chemistry. **Computer Physics Communications**, v. 82, n. 2-3, p. 91-103, 1994.

PG132

Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) for green-steam and foliar retention (GSFR) diagnosis in soybean leaves: an evaluation of calibration free (CF) method as a quantitative tool to analyze a complex biological matrix

RANULFI, A. C. [1-2]; SENESI, G. S. [3]; WATANABE, A. [2]; CAETANO, J. [2]; MEYER, M. [4]; VILLAS BOAS, P. R. [2]; MILORI, D. M. B. P. [2].

aniranulfi@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Embrapa Instrumentação de São Carlos

[3]Instituto di Nanotecnologia NANOTEC - PLasMI Lab.

[4]Embrapa Soybean de Londrina

Soybean and its derivatives are one of the most valuable and traded agricultural commodities worldwide. The major problem faced by the producers is the reduction of soybean yield due to diseases. In Brazil, the GSFR, a syndrome popularly known as "Soja Louca II", currently ascertained to be caused by the nematode *Aphelenchoides besseyi*, was recently described as affecting soybean plants and causing concerns. (1) Unfortunately, no effective methods of early diagnosis and treatments are known. In an attempt to better investigate the plant changes caused by GSFR infection, soybean leaves collected from healthy and sick plants of two varieties from Maranhão state, Brazil, were evaluated for their content of nutrients: K, Mg, Fe, Al and Mn, by LIBS (2) operating in collinear configuration, and considering Ca as the standard element. In general, the relative simplicity of LIBS instrumentation and the minimal sample preparation required makes it a valuable tool for agriculture application, including nutritional investigation and disease diagnosis of plant samples. Atomic absorption spectrometry (AAS), a trustable analytical tool but laborious and time-consuming technique, was used as reference method. The CF, an alternative to the calibration line approach usually used, is based on the LTE assumption, and more specifically on the Boltzmann distribution, through it is possible to obtain the temperature and the total number density of the given emitting species in the ground state. Since this is proportional to the species weight percentage in the sample (provided that the ablation is stoichiometric), after a normalization process it is possible to determine the element concentration. (3) The method was applied for the soy leaves samples and the behavior founded was the same presented by AAS. With the exception of manganese, that was close to the values found by the reference technique, all the other nutrients were super estimated by CF method when compared with AAS. That could be explained by losses during the acid digestion previous the AAS determination. The formation of small precipitates during digestion suggests these small losses, what could be an advantage of LIBS for that kind of analysis. Later, the last step was the demonstration of the possibility of using LIBS and CF method, associated with chemometrics, as a convenient analytical tool to discern between healthy and GSFR infected plants by analyzing quantitatively the plant nutrients composition. Applying classification via regression associated with partial least square regression it was possible to distinguish between GSFR and healthy samples with 94% of success rate. The nutrients evaluated were the five mentioned above. In conclusion, that study could demonstrate the possibility of using LIBS for nutritional quantification in plant leaf, providing also an GSFR diagnostic tool, helping

the producer to better and faster manage this disease in the field, increasing the production yield.

Palavras-chave: Nutritional evaluation. Leaf diagnosis. Calibration free. Green stem and foliar retention. Laser-induced breakdown spectroscopy.

Referências:

1 MEYER, M.C.; FAVORETO, L.; KLEPKER, D.; MARCELINO-GUIMARAES, F.C. Soybean green and stem foliar retention syndrome caused by *Aphelenchoides besseyi*. **Tropical Plant Pathology,** v.42, n.5, p.403-409,2017 doi:10.1007/s40858-017-0167-z.

2 MUSAZZI, S.;PERINI, U. **Laser-induced breakdown spectroscopy**. Berlin: Springer Verlag, 2014. doi:10.1007/978-3-642-45085-3.

3 CIUCCI, A. et al. New procedure for quantitative elemental analysis by laser induced plasma spectroscopy. **Applied Spectroscopy,** v.53, n.8,p.960-964,1999.. doi: 10.1366/0003702991947612

PG133

Desenvolvimento de biossensores de baixo custo para a detecção de biomarcadores de câncer

IBANEZ-REDIN,G.[1]; OLIVEIRA J., O. N. de[1]; GONÇALVES, D.[1]

gipi1908@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, há uma demanda crescente por métodos analíticos para detectar e quantificar biomarcadores de câncer com alta precisão e seletividade, uma vez que esta abordagem pode ser aplicada no diagnóstico, prognóstico, monitoramento e avaliação de risco de contrair enfermidades. (1) Os biossensores eletroquímicos são uma ferramenta promissora para o desenvolvimento de metodologias de detecção sensíveis e precisas por serem rápidos seletivos e de fácil manipulação em comparação aos métodos tradicionais. (2) Porém, apesar do potencial desses dispositivos, algumas limitações, tal como custo de produção, precisam ser superadas antes de sua adoção como tecnologia para análises clínica. Neste projeto, pretende-se produzir biossensores de baixo custo para a detecção de biomarcadores de câncer baseados em eletrodos impressos elaborados utilizando técnicas de impressão por serigrafia e substratos econômicos, flexíveis e de fácil aquisição. Em uma primeira abordagem, foi desenvolvido um imunossensor eletroquímico sem marcação para a detecção do antígeno CA 19-9. Os dispositivos baseados em eletrodos de carbono impressos em tereftalato de poliestireno foram modificados com filmes de negro de fumo (CB, do inglês *Carbon Black*), um nanomaterial de carbono de baixo custo e excelentes propriedades eletroquímicas que permanece inexplorado no desenvolvimento de biosensores para a detecção de biomarcadores de câncer. O imunossensor apresentou um valor de limite de detecção de 0,07 U mL^{-1}, comparável aos encontrados na literatura para outros dispositivos eletroquímicos empregados na detecção de CA 19-9, além de excelente reprodutibilidade de fabricação e estabilidade. As caracterizações físicas e eletroquímicas dos dispositivos, assim como a otimização dos parâmetros analíticos, serão apresentados.

Palavras-chave: Câncer. Immunosensores. Carbon black. Screen-printed electrodes. Biomarcadores.

Referências:

1 HENRY, N. L.; HAYES, D. F. Cancer biomarkers. **Molecular Oncology**, v.6, n.2, p. 140-146, 2012.

2 BOHUNICKY, B.; MOUSA, S.A. Biosensors: The new wave in cancer diagnosis. **Nanotechnology, Science and Applications**, v.4, p. 1-10, 2010.doi: /hrefhttps://dx.doi.org/10.2147%2FNSA.S1346510.2147/NSA.S13465.

PG134

Dispositivos de aplicação intradérmica para otimização nos processos da formação e distribuição de PpIX no tratamento de câncer de pele por terapia fotodinâmica

REQUENA, M. B [1]; RUSSIGNOLI, P. E [1]; SALVIO, A. G. [2]; FORTUNATO, T. C [1]; VOLLET FILHO, J. D. [1,3]; PRATAVIEIRA, S. [1]; FERNANda, A. D. [4]; doNNELLY, R. F. [4]; BAGNATO, V. S .[1]

requenamichelle@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Pele e Partes Moles - Hospital Amaral Carvalho - Jaú - SP

[3] Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP

[4] School of Pharmacy - Queen's University Belfast

Em Terapia Fotodinâmica (TFD), a protoporfirina IX (PpIX) é um fotossensibilizador (FS) endógeno bastante utilizado a partir da aplicação de precursores, como o ácido aminolevulínico (ALA) e aminolevulinato de metila (M-ALA). A barreira de permeação dos precursores através da pele é uma limitação significativa da PDT tópica, e tem uma influência direta no sucesso da aplicação. A entrega intradérmica de fármacos tem sido estudada para lidar com esse obstáculo; há técnicas promissoras baseadas em equipamentos em microescala, incluindo injetores de líquido e pó, microagulhas e termoablação. (1) Para o tratamento do câncer de pele com TFD, o fornecimento intradérmico pode proporcionar maior homogeneidade na distribuição dos precursores, aumento da penetração (2) e acúmulo do FS, possibilitando obter uma terapia mais eficiente, que pode resultar em aumento da taxa de cura e diminuição das recorrências em relação ao tópico. Este trabalho tem por objetivo entender os aspectos fundamentais da administração intradérmica de precursores de FS por meio de novas tecnologias, a fim de aumentar a profundidade de entrega de FS, para tornar a TFD uma opção preferencial no tratamento de uma maior gama de lesões de pele. Foram realizados experimentos *in vivo* em modelo de pele normal de ratos, em modelo tumoral em camundongos, além de um estudo clínico em andamento com a aplicação dos precursores da PpIX por dermógrafo. Este dispositivo é semelhante a uma máquina de tatuagem, mas com uma manipulação mais simples. A partir da formulação de Donnelly et. al (3), também foi desenvolvido um modelo de microagulhas polimérias dissolvíveis para entrega de ALA, estes dispositivos foram caracterizados em termos de estabilidade e resistência mecânica e serão aplicados em modelo de tumor em camundongos. Os resultados obtidos no projeto permitiram o monitoramento da produção de PpIX, avaliação do FS em profundidade e análise do dano por TFD comparando a entrega intradérmica com a aplicação tópica de precursores.

Palavras-chave: Terapia fotodinânica. Intradérmica. Microagulhas.

Referências:

1 ARORA, A.; PRAUSNITZ, M. R.; MITRAGOTRI, S. Micro-scale devices for transdermal drug delivery. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 364, n. 2, p. 227-236, 2008.

2 GRACIELLI, P. R. S., et al. Microneedles rollers as a potential device to increase ALA diffusion and PpIX production: evaluations by wide-field fluorescence imaging and fluorescence spectroscopy. **Proceedings of SPIE**, v. 8926, p. 892614-1-892614-7, 2014. doi: 10.1117/12.2040618.

3 DONNELLY, R. F. et al. Microneedle arrays permit enhanced intradermal delivery of a preformed photosensitizer. **Photochemistry and Photobiology**, v. 85, n. 1, p. 195-204, 2009.

PG135

Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes

RIGHETTO, G. M. [1]; SANTOS FILHO, N. A. [2]; CILLI, E. M. [3]; BELTRAMINI, L. M. [1]; CAMARGO, I. L. B. C [1]

gabriela.righetto@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Campus Experimental de Registro - UNESP

[3]Instituto de Química de Araraquara - UNESP

O uso excessivo de antibióticos resultou no aparecimento de multirresistência bacteriana, que se tornou um alerta no campo da saúde(1). Com isso, a OMS recentemente listou as bactérias críticas para o desenvolvimento prioritário de antibióticos(2) e dentro deste contexto, as bactérias ESKAPE (*Enterococcus faecium*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa* e *Enterobacter* spp.) tornam-se destaque. Com a escassez de novas moléculas antibacterianas, cresce o interesse em peptídeos com propriedades antimicrobianas – os AMP's (do inglês *Antimicrobial Peptides*). Este projeto visa o melhoramento das atividades dos AMP's Plantaricina 149 (sequência YSLQMGATAIKQVKKLFKKKGG) e Bothropstoxina-I (sequência KKYRYHLKPFCKK). Estes possuem concentrações de ação muito mais altas do que as concentrações *in vitro* de antibióticos comerciais. Análogos baseados nestes peptídeos serão sintetizados visando potencializar a ação destas moléculas, aumentar sua seletividade e reduzir seu tamanho. Os análogos sintéticos serão avaliados quanto: sua capacidade antimicrobiana em diversas linhagens de bactérias contidas no topo da lista da OMS (através da determinação da concentração inibitória mínima e concentração bactericida mínima), a sua capacidade de reduzir a biomassa de biofilme formado por *Staphylococcus epidermidis*, seus mecanismos de ação (por meio de estudos de despolarização de membrana, cinética de morte e ensaio de efeito pós-antibiótico) e sua citotoxicidade (através da avaliação da atividade hemolítica e teste de MTS). Até o momento, já foram sintetizados sete análogos da Plantaricina 149 e cinco análogos da Bothropstoxina-I que foram avaliados quanto a sua concentração inibitória mínima para as seguintes bactérias: *S. epidermidis* ATCC 35984, *S. aureus* ATCC 25923, *E. faecalis* ATCC 29212, *E. faecium* ATCC 700221, *K. pneumoniae* ATCC 700603, *E. coli* ATCC 25922, *A. baumannii* ATCC 19606, *P. aeruginosa* ATCC 27583. Dois dos análogos sintetizados para cada AMP apresentaram resultados promissores, com ação antimicrobiana em todas as bactérias testadas. Isto indica o alto potencial de aplicação destas moléculas, evidenciando tanto a possibilidade de otimizações quanto seu amplo espectro de ação. Após o teste de hemólise mais análogos poderão ser sugeridos para serem avaliados e prosseguirem para os demais estudos de caracterização.

Palavras-chave: Plantaricina. Bothropstoxina. Peptídeo. Multirresistencia. Antibiótico.

Referências:

1 O'NEILL, J. Antimicrobial resistance: tackling a crisis for the health and wealth of nation. **Review on Antimicrobial Resistance**,.2014. Disponivel em:<https://amr-review.org/sites/default/files/AMR%20Review%20Paper%20-%20Tackling%20a%20crisis%20for%20the%20health%20and%20wealth%20of%20nations_1.pdf>.

Acesso em: 30 ago. 2018.

2 ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAUDE. **OMS publica lista inédita de bactérias resistentes a antibióticos**. Disponível em <https://nacoesunidas.org/oms-publica-lista-inedita-de-bacterias-resistentes-a-antibioticos/>. Acesso em: 16 de janeiro de 2018.

PG136

Aquisição de biopotencial em uma interface sensorial sem fios para optogenética

BRUNELLI, R. [1]; ANDRAde, R. A. P. [2]; MASCARENHAS, S. [1]

digon.brunelli@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Optogenética é a combinação de genética e métodos óticos para obter ganho ou perda de funções em eventos bem definidos em células específicas de tecidos vivos. (1) A tecnologia consiste em ferramentas de controle genético por meio de luz e tecnologia para transferir luz nas regiões investigadas de forma controlada. Com o uso dessa técnica, é possível estudar e mapear de forma precisa o comportamento dos diferentes tipos de células principalmente as células do sistema nervoso central que são responsáveis pelas principais funções do corpo como as funções motoras. Os trabalhos nesta área requerem equipamentos robustos para a atuação ótica e aquisição dos biopotenciais, que seria a capacidade de eletronicamente realizar a leitura, amplificação e conversão de sinais de origem biológica, com alta taxa de resolução e taxa de amostragem entre diversos canais simultaneamente, atingindo um maior controle dos efeitos causados nos neurônios com a utilização da técnica. Porém esses equipamentos costumam ser complexos, caros, grandes e necessitam de fios para transferir luz e receber o sinais neuronais, dificultando os estudos por limitar a liberdade de movimentação do animal que é necessária. Está sendo desenvolvido uma interface sensorial sem fios vestível para optogenética, esse sistema consiste na atuação ótica e aquisição do biopotencial com um microcontrolador fazendo o processamento e comunicação sem fio, além do gerenciamento de energia. Este trabalho foca no desenvolvimento da aquisição do biopotencial e envio dos dados sem fio, tendo como resultado a aquisição de 8 canais com 17 bits efetivos em uma taxa 16.000 amostras por segundo, onde o sinal é processado e compactado, sem perda de informação, para ser enviado por bluetooth 5.0 sem perda de pacotes e atraso fim a fim.

Palavras-chave: Optogenética.

Referências:

1 DEISSEROTH, K. Optogenetics. **Nature Methods**, v. 8, n.1, p.26-29, 2011.

PG137

Avaliação de um sistema portátil de tempo de vida de fluorescência para diferenciar lesões de pele clinicamente semelhantes

ROMANO,R. A. [1]; PRATAVIEIRA, S. [1]; KURACHI, C. [1]

renan.romano@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O câncer de pele é o mais incidente no Brasil, sendo responsável por cerca de 30% de todos os cânceres. Neste contexto, o diagnóstico precoce é muito importante pois caso detectada e tratada precocemente a possibilidade de cura é muito maior. Diversas técnicas tem sido aplicadas para tentativa de diagnóstico destas lesões, dentre elas as técnicas ópticas ganham destaque por não serem invasivas e por sua rapidez. Neste contexto, técnicas baseadas em fluorescência tem sido extensivamente utilizada nas ciências biológicas. Dentre elas, a técnica de imagem de tempo de vida de fluorescência (FLIM - Acrônimo do inglês Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy) tem ganhado grande destaque devido à sua notável habilidade de detectar modificações bioquímicas em tecido biológico. Sabe-se que estas modificações metabólicas podem ser causadas por condições malignas do tecido, deste modo, a técnica FLIM pode ser utilizada como método auxiliar de diagnóstico. (1-2) Neste trabalho é reportada a avaliação preliminar de um equipamento FLIM em discriminar entre lesões malignas ou benignas de pele. O sistema utilizado conta com um laser pulsado emitindo em 355 nm para excitação do tecido biológico e a fluorescência é coletada em três canais (390 ± 20 nm; 452 ± 22 nm; > 496 nm). Estes canais foram escolhidos de modo a monitorar os fluoróforo endógenos (Colágeno e Elastina, NADH e FAD) que estão ligados à cadeia respiratória e a liberação de energia nas células. A hipótese é que estes fluoróforos sofram alterações no tempo de vida de fluorescência, permitindo assim o diagnóstico. O processamento das imagens foi realizado utilizando algoritmos supervisionados e não supervisionados. Buscando mapear em tempo real a localização das bordas do tumor, os algoritmos não supervisionados tais como os de vizinhos mais próximos e de separação linear qualitativa foram utilizados, estes se mostraram capazes de diferenciar entre tecido sadio e doente especialmente em lesões pigmentadas. Já para discriminar entre lesões malignas e benignas clinicamente semelhantes foram utilizados algoritmos supervisionados tais como método dos mínimos quadrados parciais e redes neurais, mostrando-se estes capazes de diferenciar lesões clinicamente semelhantes com altas taxas de acerto.Conclui-se que neste projeto, através das imagens de tempo de vida de fluorescência processadas com diferentes algoritmos, tem sido possível não só mapear em tempo real as bordas do tumor, bem como discriminar as lesões malignas das benignas que são clinicamente semelhantes.

Palavras-chave: Óptica. Tempo de vida de fluorescência. Câncer de pele.

Referências:

1 BORST, J. W.; VISSER, A. J. W. G. Fluorescence lifetime imaging microscopy in life sciences. **Measurement Science and Technology**, v. 21, n. 10, p.102002-1-102002-21, 2010.

2 BEREZIN, M. Y.; ACHILEFU, S. Fluorescence lifetime measurements and biological imaging. **Chemical Reviews**, v. 110, n. 5, p. 2641-2684, 2010.

PG138

Estudos no diamante para aplicações em tecnologias quânticas

ONCEBAY SEGURA, C. O. [1]; ALMEIda, J. M. P. [1]; MENdoNÇA, C. R. [1]; MUNIZ, S. R. [1]

charlieoncebay@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Estudos de materiais geralmente implicam estudos de defeitos, já que estão intimamente relacionados às propriedades dos materiais. Portanto, uma boa compreensão dos fenômenos de defeito é fundamental no controle das propriedades dos materiais. No presente trabalho abordamos a obtenção e a caracterização dos centros NVs em diamante. O defeito NV consiste em um átomo de nitrogênio substitucional (N) combinado com uma vacância (V) em um dos locais vizinhos mais próximos da rede cristalina de diamante. O centro NV pode ser neutro NV^0 ou pode ter carga negativa NV^- (1), estes centros têm propriedades ópticas e de spin diferentes. Só o defeito carregado negativamente do defeito é interessante para magnetometria e outras aplicações tecnológicas. (2-3) O elétron extra no NV^- é colocado na vacância e o acoplamento com os elétrons desemparelhados é tal que o spin é igual a 1, o qual pode ser inicializado, coerentemente manipulado e lido opticamente. No presente trabalho estudamos o comportamento do coeficiente de absorção de dois fótons (β) e do índice de refração (n_2) do diamante usando laser de femtosegundos em uma ampla faixa espectral. Também abordamos a obtenção e a caracterização dos centros NVs em diamante produzidos pelo método de micro-fabricação. Por fim, mapeamos quantitativamente a estrutura vetorial do campo magnético produzido por uma amostra próxima à superfície de um diamante CVD que contém uma fina camada de centros NV.

Palavras-chave: Centros de Nitrogênio-vacância. Diamante. Magnetometria.

Referências:

1 DOHERTY, M. W. et al. Theory of the ground-state spin of the NV- center in diamond. **Physical Review B**, v. 85, n. 20, p. 205203-1-205203-11, May 2012.

2 MAZE, J. R. et al. Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond. **Nature**, v. 455, n. 7213, p. 644-648, 2008.

3 HAUSMANN, B. J. M. et al. Diamond nonlinear photonics. **Nature Photonics**, v. 8, n. 5, p. 369-374, 2014.

PG139

Estudos computacionais para o planejamento de novos moduladores da proteína tubulina com propriedades antitumorais-propriedades antitumorais

PALOMINO-SALCEdo, D. L. [1]; MAGALHÃES, L. G. [1]; ANDRICOPULO, A. D. [1]

palomino@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física São Carlos - USP

O câncer está definido como uma série de doenças correlacionadas nas quais as células de um tecido começam a se dividir e espalhar sem controle pelos outros tecidos do corpo. (1) Dados da Organização Mundial da Saúde (OMS) para 2030 indicam que 18% das mortes no mundo serão causadas pelo câncer. Os microtúbulos, componentes básicos do citoesqueleto, são filamentos formados pela polimerização de α- e β-tubulina, sendo essenciais para todas as células eucariotas ao serem importantes em diferentes processos celulares. (2) Devido ao seu papel crucial na formação do fuso mitótico na divisão celular, os microtúbulos são considerados um atrativo alvo para o desenvolvimento de candidatos a novos fármacos anticâncer. Os compostos que se ligam aos microtúbulos desestabilizam a sua dinâmica induzindo a apoptose, ou seja, a morte celular. Este trabalho visa usar uma serie de ferramentas computacionais com o intuito de desenhar uma metodologia que possa ser usada no Laboratório de Química Medicinal e Computacional do IFSC-USP, para auxiliar no planejamento de moléculas farmacofóricas. O objetivo é propor um protocolo de experimentos in-silico com o fim de estimar os valores de atividade biológica de uma série de moléculas moduladoras da polimerização de tubulina, no intuito de diminuir os custos de usar métodos in-vitro. Neste projeto se usarem algumas destas ferramentas computacionais (modelagem molecular, docagem molecular, dinâmica molecular e cálculos de energia de ligação) com o intuito de estimar a potência de moléculas farmacofóricas desenhadas e testadas no laboratório. (3) Os resultados até o momento mostram que o protocolo pode ser útil, principalmente na determinação do isômero ativo. Contudo é preciso melhorar o método de amostragem de conformações da proteína.

Palavras-chave: Câncer. Tubulina. Planejamento de fármacos.

Referências:

1 NATIONAL CANCER INSTITUTE. **What is cancer?** Disponível em: <https://www.cancer.gov/about-cancer/understanding/what-is-cancer> Acesso em: 15 abr. 2018.

2 MASSAROTTI, A. et al. The tubulin colchicine domain: a molecular modeling perspective. **ChemMedChem**, v. 7, n. 1, p. 33-42, 2012.

3 MAGALHÃES, L. G. et al. Discovery of a series of acridinones as mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. **PloS ONE**, v. 11, n. 8, p. e0160842-1-e0160842-17, 2016.

PG140

Quantum subradiance in a ultracold dilute cloud of two-level atoms driven by a scalar light

ESPIRITO SANTO, T. S. do [1]

tiagosantiago@usp.br

BACHELARD, R. P. M. [2]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Física - UFSCar

The interaction of light with cold atoms (1) have been a object of great interest and the cooperative scattering of light gives clues of the rich many body-physics effects. Since Dicke's work on coherence in the spontaneous emission (2) super and subradiance have been studied both from the theoretical and experimental side. These effects relation with lamb shift, single photon sub and superradiance and the superradiance relation with the radiation pressure force have been described. The long-range (1/r) light mediated effective coupling between atoms leads to many-body cooperative effects, even on the dilute regime, creating new lifetimes that can be applied to storing information and to a fast read out of the data. While this cooperative effects are well described in the classical linear optics limit, in which the saturation. parameter s $= 2\Omega^2/(\gamma^2 + 4\Delta^2)$ is very small s « 1, little is known in the quantum saturated regime s » 1. In a recent work the role of the quantum correlations in the fluorescence power spectrum was discussed (3) We study the decay dynamics of the intensity of the fluorescence field after a switch-off of the laser beam after the system has reach the steady-state. We demonstrate that the quantum correlations leads to the survival of subradiance in the saturated regime and that subradiance is possible for the states with at most N excitations.

Palavras-chave: Cold atoms. Cooperative effects. Subradiance.

Referências:

1 GUERIN, W.; ROUABAH, M.T.; KAISER, R. Light interacting with atomic ensembles: collective, cooperative and mesoscopic effects. **Journal of Modern Optics**, v.64, p. 895-907, 2016. doi: 10.1080/09500340.2016.1215564

2 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review**, v. 93, n. 1, p. 99-110, 1954.

3 PUCCI, L. et al. Quantum effects in the cooperative scattering of light by atomic clouds. **Physical Review A**, v. 95, n. 5, p. 053625, 2017.

PG141

Estudo da via de incorporação de selenocisteínas: compreensão dos mecanismos de interações macromoleculares

FERNANdeS, J. S. [1]; SERRAO, V. H. B. [2]; FERNANdeS, A. F. [1]; BASSO, L. G. M. [3]; NETO, M. O. [4]; THIEMANN, O. H. [1]

jessica.scortecci@usp.br

[1] Instituto de Fisica de São Carlos - USP

[2] University of Toronto

[3] University of California - San Diego

[4] Universidade Estadual Paulista "Julio de Mesquita Filho- UNESP

A existência de uma maior variedade de aminoácidos codificados pelo código genético tem estimulado estudos sobre os mecanismos de síntese, reconhecimento e incorporação nas cadeias polipeptídicas nascentes. Como exemplo, pode-se destacar a via específica de síntese do aminoácido selenocisteína que é incorporado em um códon UGA através de um evento co-traducional tanto presente em procariotos e eucariotos. Em bactérias, a via de síntese de Sec é composta pelas proteínas Selenocisteína sintase (SelA), Fator de Elongação Específico (SelB), Selenofosfato sintetase (SelD), Seril-tRNA sintetase (SerRS) e Selenocisteína liase (CsdB). A via de síntese e incorporação de Sec depende também de dois RNAs; um tRNA específico ($tRNA^{Sec}$) e uma sequência no mRNA (Sequência de Inserção de Selenocisteínas - SECIS), sinalizadora para correta incorporação de Sec junto ao códon UGA. Em eucariotos, essa via difere pela presença das proteínas O-fosfoseril-$tRNA^{Sec}$ Quinase (PSTK) e Selenocisteil–$tRNA^{Sec}$ sintase (SepSecS), em substituição a SelA, e pela presença de proteínas ligadoras ao elemento SECIS (SBP2).(1) Pelo fato do selênio ter uma toxicidade elevada no ambiente celular, é fundamental a compreensão do mecanismo catalítico e de elementos essenciais na formação dos complexos da via na etapa de incorporação junto ao $tRNA^{Sec}$. Em bactérias, a interação entre CsdB e SelD foi proposta em 2009, no entanto, não verificada experimentalmente até o momento. (2) Além disso, nosso grupo descreveu a presença da via de síntese de selenocisteínas em *Naegleria gruberi* (3), ameba não patogênica empregada como modelo para estudos de *N. fowleri,* conhecida a infectar humanos, resultando na patologia conhecida como *Meningoencefalite Amebiana Primária* (MAP). Este projeto visa estudos bioquímicos e estruturais das proteínas CsdB e SelD de *Escherichia coli*, bem como SBP2 de *N. gruberi* para determinar as interações moleculares que determinam a especificidade dessas enzimas. Ensaios de interação entre CsdB.SelD e SBP2.SECIS foram realizados a fim de determinar as constantes de interação através de técnicas espectroscópicas e calorimétricas. Ensaios de imunofluorescência *in vivo* da SBP2 serão realizados, em *N. gruberi*, bem como ensaios de co-imunoprecipitação e *pull down*. Estudos *in vivo* envolvendo a interação entre CsdB e SelD estão sendo realizados através de duplo híbrido dirigido em sistema *Saccharomyces. cerevisiae*. Testes de cristalização dos complexos, bem como espalhamento de raios-X a baixo ângulo foram feitos a fim de se obter modelos estruturais das proteínas de interesse. Dessa forma, este projeto visa ampliar o conhecimento e o entendimento das interações moleculares presentes na via de selenocisteínas, sendo de relevância no entendimento global dos determinantes moleculares de interação entre proteína-proteína e proteína-RNA. Com esses resultados, haverá uma contribuição na caracterização da via de incorporação de selênio além de prover modelos de interação entre proteínas que estejam envolvidas em metabolismos de elementos tóxicos.

Palavras-chave: Selenocisteína. Interação proteína-proteína. Interação proteína-RNA.

Referências:

1 HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. N. How selenium has altered our understanding of the genetic code. **Molecular and Cellular Biology**, v. 22, n. 11, p. 3565-3576, 2002.

ITOH, Y. et al. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**, v. 385, n. 5, p. 1456-1469, 2009.

3 SILVA, M. T. et al. Selenocysteine biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 188, n. 2, p. 87-90, 2013.

PG142
Is it possible to model a gluon plasma as superfluid helium?

MENdeS, T.[1]; SERENONE, W. M.[1]

willian.matioli@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

The force responsible for binding protons and neutrons together in the atomic nucleus is the strong force, which is best described by Quantum Chromodynamics (QCD). QCD has a peculiar behavior: at small distances, its coupling "constant" becomes negligible. This is called asymptotic freedom. Conversely, at larger distances it becomes strong, giving rise to color confinement. Qualitatively speaking, one expects that if hadrons are subjected to conditions where they are pushed close to each other (e.g. on high-temperature conditions as the ones on the early moments of the universe), QCD could undergo a phase transition to a state where the quarks inside the hadrons deconfine. This phase is usually called quark-gluon-plasma and it was experimentally observed by experiments at RHIC and LHC. The experiments also showed that it was possible to model the QGP as a liquid of very-low viscosity. (1) However, despite asymptotic freedom being one of the arguments leading to the QGP, it was shown that long range effects are still present on the deconfined phase. Thus, a non-perturbative approach is still necessary. One way to treat a quantum field theory (QFT) non-perturbatively is starting from its path-integral formulation, perform an analytic continuation to imaginary time and discretize the resulting Euclidean space into a lattice. (2) The introduction of the lattice acts as a regulator of the theory, cutting the usual infinities that arises in QFTs. The continuum limit must be taken with care to not reintroduce these, i.e. we must renormalize the theory. If we restrict the length of the time direction, we get a setup very similar to a statistical system at finite temperature. This setup is suitable to computations using Monte Carlo simulations as well. Chernodub *et al.* proposed that it could be possible to model the QGP using the two-component liquid model proposed by Landau to describe superfluid helium. (3) The aforementioned authors propose as well that lattice QCD computation of the (Euclidean) Green function of the energy-momentum tensor can be used as a suitable theoretical test of the proposed model. We developed a code to perform a simulation of QCD without fermions and computed the energy-momentum tensor and its Green function for temperatures below and above the phase transition on a reasonably sized lattice (32^3x6). The omission of fermions from the simulation is to reduce the computational cost of the simulation. Preliminary results obtained thus far indicate, within our statistical error, that the two-component model does not describe well the gluon plasma.

Palavras-chave: Quark-gluon plasma. Monte Carlo simulations. Quantum chromodynamics

Referências:

1 JEON, C.; HEINZ, U. Introduction to hydrodynamics. **International Journal of Modern Physics E**, v. 24, p. 1530010, 2015. doi: 10.1142/S0218301315300106

2 GATTRINGER, C.; LANG, C. **Quantum chromodynamics on the lattice**: an introductory presentation. Berlim: Springer Verlag, 2009. 343 p.

3 CHERNODUB, M. N.; VERSCHELDE, H.; ZAKHAROV, V. I. Two-component liquid model for the quarkgluon plasma. **Theoretical and Mathematical Physics,** v. 170, p. 211216, 2012. doi:1007/s11232012 00238.

PG143

Representações de superfícies moleculares em harmônicos esféricos para simulação de formação de complexos entre proteínas

SILVA, S. R. [1]; MONTALVÃO, R. W. [2]

samuelrsilva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Renner S.A.

O uso de programas de computador para simular a formação de complexos entre proteínas é uma abordagem importante para melhor compreensão de como estas moléculas interagem.(1) A representação paramétrica(2) em harmônicos esféricos e a representação em polinômios tridimensionais de Zernike(3) são ambas descrições compactas de superfícies moleculares baseadas em harmônicos esféricos utilizadas para visualização e comparação de superfícies moleculares e para atracamento de proteínas. Entretanto, apresentam limitações como restrição à topologia da superfície e dificuldade de representação de funções arbitrárias. Neste estudo, procurou-se refinar a capacidade de representação destes métodos para obtenção de elevada qualidade de reprodução e aplicabilidade a superfícies de topologia arbitrária. Através da análise de diversos algoritmos de suas etapas, foi possível identificar os estágios de cálculo de malha triangular de superfície molecular e de mapeamento esférico como os mais influentes na qualidade da representação paramétrica em harmônicos esféricos, e a alta sensibilidade a mudança de valores nas funções projetadas na qualidade da representação em Zernike 3D. A incorporação de um método de cálculo de superfícies que gera uma malha com elevada regularidade, aliado a um moderno algoritmo de mapeamento esférico garantiu baixo nível de distorções e obtenção de superfícies reconstruídas de alta qualidade. Uma técnica de detecção de similaridade entre superfícies de diferentes conformações de um ensemble permitiu compartilhamento de partes da descrição entre várias superfícies, com correspondente redução de volume de dados e de demanda por processamento, e com influência controlável nas distorções introduzidas. Um modo diferente de organização dos dados de entrada causou melhoria na qualidade de reconstrução de funções gerais em Zernike 3D, embora com a introdução de um mapa para restauração da função. Os resultados obtidos indicam aplicação promissora dos métodos em docking de proteínas com alto nível de detalhes.

Palavras-chave: Reconstrução de imagens. Superfície molecular. Atracamento de proteínas. Simulação.

Referências:

1 MONTALVAO, R. W. et al. Structure determination of protein-protein complexes using NMR chemical shifts: case of an endonuclease colicin-immunity protein complex. **Journal of the American Chemical Society**, v. 130, n. 47, p. 15990–15996, 2008.

2 DUNCAN, B. S.; OLSON, A. J. Approximation and characterization of molecular surfaces. **Biopolymers**, v. 33, n. 2, p. 219–229, 1993.

3 MAK, L.; GRANDISON, S.; MORRIS, R. J. An extension of spherical harmonics to region-based rotationally invariant descriptors for molecular shape description

and comparison. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 26, n. 7, p. 1035–1045, 2008.

PG144

Caracterização estrutural das septinas de levedura (Saccharomyces cerevisiae) Cdc3, Cdc10, Cdc11 e Cdc12

SILVA, R. M.[1]; LEONARDO, D. A.[1]; GARRATT, R. C. [1]

rafael_msilva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas estruturais que normalmente apresentam atividade GTPasica, desempenhando um papel importante na estrutura da célula e servindo como um arcabouço no recrutamento de proteínas parceiras. Para realizar suas funções, as diferentes septinas formam heterofilamentos que são estabilizados por interações entre as subunidades através de dois tipos de interface, chamadas de G e NC. (1) Compreender os mecanismos moleculares exatos que controlam a montagem correta dos filamentos individuais e posteriormente seu empacotamento em estruturas de ordem superior atualmente representa um dos maiores desafios na área de bioquímica de septinas. Para isso, ao longo dos últimos anos, o grupo de cristalografia do IFSC - São Carlos vem trabalhando com septinas humanas, tanto individuais quanto com suas combinações fisiologicamente relevantes..Por outro lado, o modelo biológico mais bem compreendido não é humano mas sim o de Saccharomyces cerevisiae, onde as septinas foram originalmente descritas (3) e para qual existe uma grande riqueza de informações fisiológicas na literatura. Entretanto, informações estruturais no caso de Saccharomyces são muito mais limitadas. . Embora a proteína Cdc11 de Saccharomyces já tenha sido purificada, cristalizada e sua estrutura reportada (2), muitos aspectos da estrutura são em demasiado inesperados, levantando dúvidas sobre a sua confiabilidade. Entre outros, os parâmetros esteroquímicos e cristalográficos fogem significativamente do normal e uma estrutura 3D diferente para uma região altamente conservada (o septin unique element) levanta suspeitas. Por este motivo, neste projeto, pretende-se re-determinar a estrutura da cdc11 usando o protocolo da literatura e depois estender os estudos estruturais para outras septinas de levedura.. A capacidade de replicar um experimento que gerou dados duvidosos na ciência é fundamental para sua validação. Tal pratica também se mostra imprescindível para evitar que uma eventual propagação do erro se torne alicerce de uma área de pesquisa. A análise da(s) estrutura(s) resultante(s) deste trabalho será feita no contexto do que já foi relatado na literatura a seu respeito (Brausemann et al, 2016), e correlacionado com outras informações bioquímicas, inclusive a capacidade da cdc11 de ligar (ou não) e hidrolisar GTP. A estrutura da cdc11 também permitirá a descrição da natureza da sua interface NC, essencial para a formação de filamentos. O conhecimento adquirido deve contribuir para correlacionar aspectos estruturais e funcionais de septinas de leveduras, considerada até hoje um elemento negligenciado do citoesqueleto.

Palavras-chave: Cdc11. Septinas. Levedura.

Referências:

(1) BERTIN, A. et al. Saccharomyces cerevisiae septins: supramolecular organization of heterooligomers and the mechanism of filament assembly. **Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America**, v. 105, n. 24, p. 8274–8279, 2008.

(2) BRAUSEMANN, A. et al. Crystal structure of Cdc11, a septin subunit from Saccharomyces cerevisiae. **Journal of Structural Biology**, v. 193, n. 3, p. 157–161. 2016.

(3) HARTWELL, L. H. Genetic control of the cell division cycle in yeast. IV: genes controlling bud

emergence and cytokinesis. **Experimental Cell Research**, v. 69, n. 2, p. 265–276,1971.

PG145
Epidemic spreading with awareness and different time scales

SILVA, P. C. V. [1]; VAZQUES, F. [2]; MORENO, Y. [3]; RODRIGUES, F. A. [4]

paulo.pc.vs@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

[3] Institute for Biocomputation and Physics of Complex Systems - University of Zaragoza

[4] Instituto de Cálculo - Universidad de Buenos Aires

An important challenge to the theoretical modeling of epidemics is to understand the impact of the several factors that may influence the disease spread, which is a very complex phenomenon. It is well known that the human behavior has an important influence on the spreading dynamics (1), being able to either impair or enhance the epidemics. In particular, people that are aware of the risks of a certain disease can take measures to reduce or even eliminate their chance of contracting the disease. In this work, we propose a computational model for the spread of a disease and, simultaneously, the word-of-mouth spread of an information about the disease. Each process is held in one layer of a two-layer multiplex network. As an enhancement from previous models (2), we consider a Maki-Thompson rumor model for the information spreading with a forgetting mechanism that renews the information cycle. Flexibility on the time scale between information and disease spreading is also considered, and the size of the outbreak is studied as a function of the time scale. We verify that, as in previous works, the characteristics of the information spread influence the disease outbreak size and the epidemic threshold. If we modify our baseline model to consider that infected individuals take longer to forget the information (and therefore be able to become a spreader again), the outbreak size may increase, despite the fraction of the population that is informed also increases. This behavior, however, may be or not present depending on the relative time scale between epidemics and information, which is therefore an important parameter to understand the interplay between the two processes. Our results provide new insights about the influence of the information to the epidemic spreading, and also highlight the importance that infected individuals spread the information about their own condition to their closest contacts.

Palavras-chave: Epidemic model. Multiplex networks.

Referências:

1 MANFREDI, P.; D'ONOFRIO, A. (Eds.) **Modeling the interplay between human behavior and the spread of infectious diseases**. New York: Springer, 2013.

2 GRANELL, C.; GÓMEZ, S.; ARENAS, A. Dynamical interplay between awareness and epidemic spreading in multiplex networks. **Physical Review Letters**, v. 111, n. 12, p. 128701-1-128701-5, 2013.

PG146

Desenvolvimento e aplicações de nanopartículas poliméricas contendo ácido aminolevulínico (ALA) para o tratamento de tumores de pele mais profundos

SILVA, G. R. [1,2]; SANTOS, A. L. [2]; INAda, N. M. [1]

geisiane.silva@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Nanomed – Inovação em Nanotecnologia - São Carlos - SP

O câncer de pele do tipo não-melanoma é o mais frequente no Brasil, com estimados 165.580 novos casos para 2018 e mais de 1.700 mortes. A Terapia Fotodinâmica (TFD) para os casos de lesões superficiais (até 6 mm de profundidade) já é a de escolha em muitos países. (1) Por outro lado, alcançar taxas elevadas de cura torna-se desafiador quando as lesões atingem camadas mais profundas da pele, pois o pró-fármaco ácido aminolevulínico (ALA) tem limitada permeação transcutânea. (2) Assim, nanopartículas de poli(D, L- ácido lático-co-glicólico) (PLGA) são sistemas promissores para aumentar a eficiência na entrega do ALA, aumentando tanto a taxa de sucesso na cura, como no número de pacientes que poderão ser curados por essa técnica não invasiva e com os melhores resultados estéticos que a cirurgia. (3) Três sistemas (A, B e C) de NP-PLGA-ALA foram desenvolvidos e diferenciados pela funcionalização do biopolímero polietileno glicol (PEG). Por microscopia de força atômica foi possível caracterizar a morfologia das partículas como esféricas e superfície sem rugosidade. Os diâmetros hidrdinâmicos foram determinados por espalhamento de luz dinâmico como, A: 469,1 $\pm$ 5,2; B: 259,7 $\pm$ 3,9 e C: 384,2 $\pm$ 1,9 nm e com os respectivos valores de potencial Zeta de A: -4,62 $\pm$ 0,07, B: -24,4 $\pm$ 3,1) e C: -2,97 $\pm$ 0,2 mV. Os sistemas estão fisicamente estáveis quando mantidos à 4 °C, preservando as características físico-químicas iniciais. Estudos *in vitro* com células de carcinoma epidermóide humano (A 431 ATCC© CRL-1555 ™) fazem parte da próxima etapa de avaliação da eficácia terapêutica da TFD mediada por NP-PLGA-ALA, em comparação com o ALA livre.

Palavras-chave: Nanopartículas poliméricas. Poli(ácido lático-co-ácido glicólico). Ácido aminolevulínico. Terapia fotodinâmica. Câncer de pele não-melanoma.

Referências:

1 RAMIREZ D. P. et al. Experience and BCC subtypes as determinants of MAL-PDT response: preliminary results of a national Brazilian project. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 11, n. 1, p. 22-26, 2014.

2 PASSOS, S. K. et al. Quantitative approach to skin field cancerization using a nanoencapsulated photodynamic therapy agent: a pilot study. **Clinical, Cosmetic and Investigational Dermatology**, v. 6, p. 51-59, 2013. doi: 10.2147/CCID.S36758.

3 WANG, X. et al. In vivo study of ALA PLGA nanoparticles-mediated PDT for treating cutaneous squamous cell carcinoma. **Proceedings of SPIE**, v. 9230, p. 92301D-1-92301D-8, 2014. doi: 10.1117/12.2069455.

PG147
Conceito de visões ao PyMR e integração ao Spyder

SILVA, L. C. R. [1]; PIZETTA, D. C. [1]; TANNÚS, A. [1]

lucas.carvalho.silva@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O framework PyMR *(Python Magnetic Resonance)* foi desenvolvido com o objetivo de ser uma camada de abstração entre o hardware e software para sistema de Ressonância Magnética (MR), de modo a oferecer classes específicas para cada tipo de hardware existente em um sistema real de MR. (1) Como existem diversas maneiras de visualizar as configurações de um sistema, e o PyMR apenas oferece uma forma básica de visualização na forma de uma árvore hierárquica, foi necessário trazer o conceito de visões para o framework. Esse conceito foi implementado na forma de janelas que permitem diferentes grupos de usuários tenham visões diferentes sistema. Para criar uma visão é necessário criar um arquivo de *template* usando o QtDesigner, um software para desenho de interfaces gráficas usando o conceito de *drag-and-drop* de objetos gráficos. Esse arquivo deve ser interpretado pelo PyMR onde este deve construir automaticamente a interface gráfica com base no template, foi então desenvolvido uma funcionalidade para isso, funcionando de maneira que os nomes colocados dentro do mesmo são os das classes existentes no PyMR. Foi então desenvolvida a *setup view* uma visão para a configuração inicial de um sistema real de MR, separando os principais hardwares do sistema, a fim de deixar mais simples a configuração inicial das propriedades dos objetos do PyMR. A nova visão foi então integrada no IDE Spyder, um ambiente de desenvolvimento integrado, de modo a suprir em um único software a utilização do PyMR e o desenvolvimento de sequências de MR. A funcionalidade de criação automática da interface gráfica por meio de um template, faz com que um usuário não programador consiga desenhar uma visão completa e funcional de forma simples. Além disso integrando o PyMR com o Spyder, torna a instalação e utilização do sistema facilitada em qualquer sistema operacional, dando maior robustez ao sistema como um todo.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Framework. Ambiente integrado.

Referências:

1 PIZETTA, D. C. **Biblioteca, API e IDE para o desenvolvimento de projetos de metodologias de Ressonância Magnética**. 2014. 93 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

PG148

Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos em regime turbulento

SMAIRA, A. F. [1]
andre.smaira@usp.br
TELLES, G. D. [1]
BAGNATO, V. S. [1]
[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho apresentamos e discutimos os resultados e propriedades de turbulência em condensados de Bose-Einstein (1) adquiridas de imagens de tempo de voo processadas usando algoritmos complexos capazes de extrair informações relevantes das flutuações de densidade atômica regularmente observada nesse tipo de amostra. (2) Baseando-nos em processamento avançado somos capazes de ir além dos resultados padrões, já apresentados, e determinar mapas de "momentum"(3), flutuações de densidade e correlações, propriedades de vórtices, assim como desenvolver outros tipos de análise, para ajudar em uma melhor caracterização e entendimento dos regimes turbulentos e outras propriedades relacionadas. Nesse cenário, estamos desenvolvendo uma biblioteca de processamento especializada para ser usada nas análises e na determinação de propriedades não triviais, que são essenciais para o futuro da pesquisa de gases turbulentos degenerados. Nosso foco principal nesse momento é a reconstrução tridimensional de uma nuvem atômica partindo de no máximo três imagens não ortogonais de absorção em tempo de vôo. Para isso usamos a “transformada inversa de Radon (princípio da tomografia computadorizada) tridimensional”, porém, ao contrário do que exige o teorema da indeterminação, que estabelece que a quantidade de imagens necessárias seja suficientemente grande, temos poucas imagens. Tal problema é amenizado, mas não solucionado, usando métodos de correções iterativas.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Física atômica. Átomos frios.

Referências:

1 WHITE, A. C.; ANDERSON, B. P.; BAGNATO, V. S. Vortices and turbulence in trapped atomic condensates. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 111, Suppl. 1, p. 4719-4726, 2014.

2 TAVARES, P. E. S. **Excitations in Bose-Einstein condensates**: collective modes, quantum turbulence and matter wave statistics. 2016. 134 p. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

3 BAGNATO, G. D. G. **Determinação da distribuição de momento em superfluidos atômicos aprisionados**: regimes turbulento e não turbulento. 2013. 113 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

PG149

Efeitos coletivos nos processos de interação radiação-matéria: superátomos, superradiância e superabsorção

SOARES, P. M. [1]; ROSETTI, R. F.[1]; MORAES NETO, G. D. de [1]; VILLAS-BOAS, C. J. [1]; MOUSSA, M. H. Y. [1]

pmsoares02@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

Conceitualmente, todo sistema físico com características de superradiância (1) pode apresentar o efeito oporto: superabsorção. A tendência natural é que as excitações presentes na amostra sejam transferidas para os infinitos graus de liberdade do reservatório térmico num processo irreversível. Logo, explorar a absorção de excitações térmicas é uma tarefa difícil, já que, devido as flutuações do vácuo, a emissão sempre predomina durante a dinêmica incoerente. Os estados de Dicke, apropriados para descrevê-la, sormam uma escada de níveis energéticos igualmente esoaçados pelos quais o sistema atômico transita. Entretanto, nenhuma das transições nela existentes é privilegiada pelos modos do reservatório, impossibilitando que este acesse apenas uma delas em particular. Num trabalho recente, apresentado em 2014 (2), K. D. B. Higgins e colaboradores elaboraram um mecanismo de controle incoerente de uma dada transição coletiva, viabilizando a superabsorção. Ao posicionar íons numa estrutura circular, introduz-se à dinâmica livre a interação dipolo-dipolo entre primeiros vizinhos, que de forma perturbativa discrimina cada uma das transições. Somado à isso, exige-se um reservatório térmico de espectro estreito e centrado na frequência que favorece a transiçõa alvo, evitando-se que as demais sejam acionadas. Basta ajustar a temperatura do reservatório para a dada transição, e efetivamente produzir um sistema de dois níveis que superabsorve excitações térmicas. Este resultado amplia os conhecimentos sobre a superradiância e fornece novas perspectivas. A seletividade de estados de Fock (3), possui notória analogia com que foi anteriromente. Obtida por meio da engenharia de interações, a seletividade consiste eme restringir o sub-espaço dos estados do campo, de forma que apenas dois consecutivos apresentem população não nula. Aplicado aos estados de Dicke, este conceito viabilizaria o super-átomo: um sistema de dois níveis efetivo que preserva as características coletivas de origem, e interage com o modo do campor de radiação. Já o trabalho sobre geração de estados de Fock estacionários via engenharia de reservatóriso, toraria-se o ponto de partida para a proteção de emaranhados coletivos. como na superradiância e na superabsorção, em que uma amostra atômica comporta-se como um único átomo via correlação entre seus momentos de dipolo, o objetivo do projeto é a engenharia de um Hamiltoniano de interação entre uma amostra atômica e um modo do campo de radiação em que a amostra atua como um único átomo, ou por assim dizer, um superátomo.

Palavras-chave: Superradiância. Engenharia de reservatórios. Engenharia de interações

Referências:

1 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review Letters**, 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. doi: 10.1038/ncomms5705.

3 PRADO, F. O. et al.Engineering selective linear and nonlinear Jaynes-Cummings interactions and

applications. **Journal of Physics B**, v. 46, n. 20, p. 205501-1-205501-10, 2013.

PG150

Estudo da resposta bacteriana e avaliação do potencial de desenvolvimento de resistência em múltiplas sessões de terapia fotodinâmica antimicrobiana

SOARES, J. M. [1]; BLANCO, K. C. [1]

jennifer.soares@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Introdução: *Streptococcus pyogenes* é uma bactéria Gram-positiva responsável por cerca de 35% dos quadros de faringotonsilites em pessoas de 4 a 15 anos, sendo o tratamento padrão a administração de antibiótico como a penicilina. (1) Todavia, o uso indiscriminado destes medicamentos promove a seleção de cepas resistentes a antimicrobianos e o desequilíbrio da microbiota natural do corpo humano. Como alternativa a esses malefícios do antibiótico a terapia fotodinâmica antimicrobiana (TFDA) tem se mostrado eficaz para tratamentos de infecções bacteriana tais como as causadas por *S. pyogenes*. A TFDA baseia-se na combinação de fotossensibilizador (FS), luz e o oxigênio molecular para geração de espécies reativas de oxigênio (ERO) que causam danos irreversíveis a constituintes vitais para os microrganismos, desencadeando em sua morte. (2) Devido ao mecanismo de ação da TFDA não se espera o desenvolvimento de resistência pelos microrganismos, o que é questionável visto que naturalmente as células possuem mecanismos de proteção ao estresse oxidativo. Deste modo, há a necessidade de estudos mais aprofundados sobre a resistência em TFDA. (3) **Objetivo:** Quantificar a incorporação do FS pelo microrganismo e avaliar o potencial de desenvolvimento de resistência após sucessivos ciclos de TFDA através do estudo de limiar de dose. **Metodologia:** O FS utilizado para o estudo foi a curcumina natural (PDT Pharma©) em diferentes formulações, sendo a de xarope (água + sacarose) e a álcool/DMSO. O microrganismo foi incubado com o FS, posteriormente centrifugado e o sobrenadante coletado para análise da absorbância afim de verificar a incorporação das formulações. Para os ensaios de múltiplas sessões os microrganismos foram incubados com o xarope de curcumina natural e submetida a iluminação. As colônias sobreviventes do primeiro ciclo foram coletadas e submetida a outros nove ciclos de TFDA. **Resultados:** Foi verificado que a incorporação do xarope é superior a solução álcool/DMSO para os três microrganismos estudados (*S. pyogenes*, *S. mutans* e Isolado Clínico). As colônias de *S. pyogenes* sobreviventes não apresentaram fotorresistência após 10 ciclos sucessivos de TFDA, comprovando como um tratamento alternativo e promissor ao antibiótico.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica antimicrobiana. Resistência bacteriana. Faringotonsilites.

Referências:

1 VICEDOMINI, D. et al. Diagnosis and managementof acute pharyngotonsillitis in the primary care pediatrician's office. **Minerva pediatrica**, v. 66, n. 1, p. 69-76, 2014.

2 HAMBLIN, M. R. Antimicrobial photodynamic inactivation: a bright new technique to kill resistant microbes. **Current opinion in microbiology**, v. 33, p. 67-73, Oct. 2016. doi: 10.1016/j.mib.2016.06.008.

3 MAISCH, T. Resistance in antimicrobial photodynamic inactivation of bacteria. **Photochemical and Photobiological Sciences**, v. 14, n. 8, p. 1518-1526, 2015.

PG151

Estudo comparativo entre dinâmica molecular acelerada por Gaussianas (GaMD) e dinâmica molecular adaptativamente enviesada (ABMD) por amostragem ampliada e avaliação da energia livre

SOUSA, S. C.[1]; NASCIMENTO, A. S.[1]

stheffy.colmanetti@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

A realização de estudos teóricos em sistemas moleculares não é trivial e requer uma grande quantidade de recursos computacionais para amostrar variações nas propriedades dinâmicas e estruturais das macromoléculas. Com o intuito de otimizar as simulações computacionais e poder amostrar eventos biológicos relevantes, foram desenvolvidas técnicas de amostragem ampliadas, permitindo a amostragem de alterações conformacionais de baixa frequência de macromoléculas em tempo computacional viável. A Dinâmica Molecular acelerada por Gaussiana (GaMD) (1) e a Dinâmica Molecular Adaptativamente Enviesada (ABMD) (2) são técnicas de amostragem ampliadas recentes e bem documentadas que provaram ser eficientes. O objetivo deste trabalho foi fazer uma comparação entre estas duas técnicas. Para isso, usamos o Lisozima T4 como um modelo, que é conhecido pelo seu movimento de ajuste induzido e que está bem documentado em relação a mudança conformacional que apresenta. Três sistemas foram modelados, um contendo a enzima T4 no estado nativo (tipo selvagem), o outro com uma mutação (M6I) conhecido por resultar em uma conformação aberta entre os dois domínios da enzima e um sistema com a mutações (C54T, C97A,L99A) que permite a formação do sítio artificial na Lisozima e tendo como ligante um benzeno. Para o sistema nativo, foram simulados 10em Dinâmica Molecular. Nas simulações do GaMD, obtivemos uma força média potencial mais grosseira (PMF), definindo dois mínimos locais, correspondentes aos estados conformacionais abertos e fechados, para o sistema tipo selvagem. Para o sistema M6I, vemos uma superfície de energia com um mínimo amplo correspondente à conformação aberta. Para o sistema ligado obtivemos um mínimo amplo correspondendo a conformação fechada. Nas simulações ABMD, os resultados são semelhantes aos apresentados pelo GaMD, no entanto, já vemos um perfil de energia mais preciso em relação às simulações do GaMD. O sistema nativo foi analisado através do pyEMMA e obtvemos valores de tempo para a transição entre estados próximo de valores descritos experimentalmente pela literatura. Em conclusão, embora ambos os métodos possam definir superfícies de energia similares, na ABMD, devido ao potencial enviesado, maior convergência e cálculos mais precisos foram alcançados ao custo da escolha a priori de uma variável coletiva.

Palavras-chave: Lisozima T4. GaMD. ABMD. Amostragem ampliada. Energia livre.

Referências:

1 MIAO, Y.; FEHER, V. A.; McCAMMON, J. A. Gaussian accelerated molecular dynamics: unconstrained enhanced sampling and free energy calculation. **Journal of Chemical Theory and Computation**, v.10, n.7, p.2677-2689,2015.

2 MORADI, M.; BABIN, V.; ROLAND, C.; SAGUI, C. The adaptively biased molecular dynamics method revisited: new capabilities and an application. **Journal of Physics**: Conference Series, v.640, n.1, p.012020,2018.

PG152

Raios gamma e ondas gravitacionais originárias de cordas cósmicas supercondutoras excitadas

SOUSA, G. T. T. [1]; HARTMANN, B. [1]

tomishiyo@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

Cordas cósmicas, defeitos topológicos lineares presentes em teorias de calibre com quebra espontânea de simetria, são objetos previstos em todas as teorias supersimétricas de grande unificação consistentes com vínculos experimentais oriundos de física de partículas e cosmologia; de onde se espera que uma rede de tais objetos tenha se formado durante transições de fase do universo primordial. No entanto, a assinatura observacional destes objetos, esperada em fenômenos como a Radiação Cósmica de Fundo em Micro-ondas, o background estocástico de ondas gravitacionais ou no espectro de energias dos raios cósmicos de ultra alta energia, ainda não foi observada. Aprofundar o entendimento destes objetos é, assim, tarefa importante na perscução de uma física para além do Modelo Padrão. Cordas cósmicas podem também ser supercondutoras, se elas transportarem correntes persistentes em seu estado de menor energia. Tal supercondutividade pode ser de natureza bosônica, provocada por um campo escalar cuja simetria é espontaneamente quebrada no núcleo da corda. Essas cordas supercondutoras podem apresentar excitações radiais do campo condensado (1), com consequências não-triviais para sua microestrutura e campo gravitacional. Neste trabalho, estudaremos a estabilidade macro e microscópica de soluções radialmente excitadas. No caso de soluções instáveis, tentaremos entender possíveis assinaturas observacionais, em termos de raios gamma, raios cósmicos ou ondas gravitacionais, que podem decorrer do decaimento de tais excitações para o estado fundamental da corda.

Palavras-chave: Cordas cósmicas. Ondas gravitacionais. Raios cósmicos. Física de altas energias. Sólitons.

Referências:

1 HARTMANN, B.; MICHEL, F.; PETER, P. Radial excitations of current-carrying vortices. **Physics Letters B**, v. 767, p. 354-359, Apr. 2017. doi: 10.1016/j.physletb.2017.02.015.

PG153

Descoberta de derivados de Acridina e de Marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum

SOUZA, G. E. [1]; AGUIAR, A. C. C.[1]; GUIDO, R. V. C. [1]

guilherme.eduardo.souza@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A malária é um problema de saúde pública global, apresentando altas taxas de mortalidade, principalmente em países do continente Africano. No Brasil, a malária tem um impacto bastante relevante, sendo que em 2016 foram reportados 118 mil novos casos, incidência que aumentou cerca de 50% em 2017, com 175 mil novos casos reportados. Neste cenário, novas alternativas terapêuticas com mecanismo de ação inovador são extremamente necessárias. As enzimas glicolíticas desempenham funções importantes na biologia do *Plasmodium* spp. Por exemplo, nos estágios intraeritrocitários do Plasmodium falciparum, a principal via metabólica de obtenção energética é a glicólise. A enzima enolase (EC 4.2.1.11), presente nesta via, catalisa a interconversão reversível do 2-fosfoglicerato para fosfoenolpiruvato, e verificou-se que a enzima está associada com núcleo, vacúolo digestivo, citoesqueleto, ancorada em membranas, no plasma e envolvida no processo de invasão celular, exibindo funções não-glicolíticas. Portanto, *Pf*eno é um alvo atrativo para o desenvolvimento de fármacos antimaláricos. O objetivo deste projeto é descobrir novos compostos líderes promissores para o tratamento da malária com base nos estudos de relação estrutura-atividade (SAR) de duas séries de moléculas com perfis de atividade e segurança adequados. A série primeira investigada será a de derivados acridínicos, que foi identificada previamente na triagem da coleção Malaria Box como inibidor da enzima enolase de *P. falciparum* (*Pf*eno IC50 = 225 μ) e inibidor do crescimento *in vitro* de *P. falciparum* (EC_50 = 74 nM). A segunda série investigada será a de derivados marinoquinolinícos, que demonstraram ser inibidores potentes contra as cepas sensível (EC_50_3D7 = 39 nM) e resistente (EC_50_K1 = 41 μ), bem como inibidores extremamente seletivos (SI > 6400). (1) Métodos e estratégias em biologia molecular estrutural e química medicinal serão utilizados para o planejamento de compostos com propriedades otimizadas através da integração dos estudos em síntese orgânica, SAR e planejamento baseado em estrutura do ligante (LBDD) e do alvo molecular (SBDD). Os compostos serão avaliados em ensaios biológicos padronizados contra o parasito (cepas sensível e resistente) (2) e enzimático (Pfeno) para a determinação da potência inibitória e estudos de SAR, bem como será avaliada sua permeabilidade *in vitro* através de ensaio padronizado frente a células Caco-2. Para os compostos que apresentarem inibição significativa do crescimento do parasita (EC_50 < 100 nM) e boa permeabilidade (P > 1.5 x 10^{-6} cm/s), (3) estudos de prova de conceito (modelo *P. berghei*) serão conduzidos para determinação da atividade *in vivo* dos compostos mais promissores.

Palavras-chave: Malária. Inibidores. Desenvolvimento de fármacos.

Referências:

1 AGUIAR, A. C. C. et al. Discovery of marinoquinolines as potent and fast-acting *Plasmodium falciparum* inhibitors with *in vivo* activity. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 61, n. 13, p. 5547-5568, 2018.

2 TRAGER, W.; JENSEN, J. B. Human malaria parasites in continuous culture. **Science**, v. 193, n. 4254, p. 673-675, 1976.

3 VAN BREEEN, R. B.; YONGMEI, L. Caco-2 cell permeability assays to measure drug absorption.

Expert Opinion on Drug Metabolism & Toxicology, v. 1, n. 2, p. 175-185, 2005.

PG154

Criação de um emulador para o espectrômetro digital do CIERMag

SOUZA, P. V. B. D. [1]; VIdoTO, E. L. G. [1]; MARTINS, M. J. [1]; TANNÚS, A. [1]

pedrovbdsouza@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos – USP

A Ressonância Magnética Nuclear (RM) é uma técnica bastante importante e versátil, pois permite que, de forma não invasiva, sejam observadas e analisadas as substâncias presentes no corpo de teste, seja ele uma amostra inanimada ou um ser vivo. Contudo, a técnica é bastante complexa, necessitando de equipamento de alta tecnologia e nenhum dos equipamentos comerciais disponíveis atendem idealmente a área de Pesquisa que desenvolve novos métodos e sequências de pulsos. Diante deste contexto, o Grupo de Pesquisas do Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética (CIERMag) desenvolveu um Espectrômetro em FPGA (1-2) voltado para pesquisas científicas, que pode ser configurado para operar, idealmente, em qualquer experimento de RMN e também pode ser atualizado para auxiliar o desenvolvimento de novas sequências de pulsos. O objetivo deste trabalho é desenvolver um emulador para o Espectrômetro com as mesmas características e arquitetura, de modo que possa substituir completamente o equipamento físico. Deste modo, será possível realizar testes tanto dos softwares presentes no ambiente de operação do Espectrômetro, quanto das novas sequências de pulsos. O emulador oferecerá recursos de trabalho que não são acessíveis dentro do hardware como visualização da memória e dos registradores dos processadores, acompanhamento passo-a-passo da execução dos códigos dos processadores, monitorar as saídas e formas de onda gerados. Atualmente, o Emulador contém o Loader, responsável por receber os comandos através do protocolo UDP e interpretá-los. Dentre os comandos existentes, os mais importantes são os de escrita e leitura de dados nos processadores internos do Espectrômetro.

Palavras-chave: Emulador. Espectrômetro de Ressonância Magnética.

Referências:

1 UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO. Instituto de Fisica de São Carlos. Alberto Tannus et al.**Subsistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados de espectrômetro digital de RM**: ToRM console. BR512015001485-4, 07 dez. 2015.Registro de software.

2 SILVA, D. M. D. D. et al.Subsistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados do Espectrômetro Digital de RM: ToRM console. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 7, n. 2, p. 35-40, 2013.

PG155

Deposição de materiais metálicos em pó a laser baseado em controle por visãocComputacional

SOUZA, M. A. A. de [1]; CASTRO NETO, J. C. [1]

marcosouza@alumni.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

O emprego de lasers no processamento de materiais vem despertando o interesse ante as promissoras e inovadoras aplicabilidades desta tecnologia. Dentro deste contexto de novas aplicações, o processo de deposição de materiais metálicos em forma de pó aspergidos em direção às superfícies de interesse mediante fusão à alta temperatura despendida pelo foco do feixe de laser incidente na superfície (DML) ou simplesmente *Laser Cladding*, como é mais conhecido, tem recebido um papel de destaque, principalmente pela sua versatilidade de aplicações no campo da chamada Fabricação Aditiva a Laser (conjunto de tecnologias ou processos que utilizam uma fonte de raio laser para trabalhar com materiais diversos) (1). No entanto, um fator de extrema importância relativo a utilização desta técnica é o controle do processo, crucial para lograr resultados com alta precisão, qualidade e eficiência requeridas (2). Dentro dessa perspectiva, o projeto veio a propor a utilização de um controle inteligente para o sistema capacitando-o a avaliar as superfícies a serem trabalhadas através de algoritmos baseados em visão computacional. Isto permite o ajuste automático de determinados parâmetros pertinentes do sistema, obtendo por consequência, resultados customizados. Aplicações do procedimento remete, por exemplo, ao tratamento e recuperação de superfícies metálicas dos mais variados tipos de relevo, processo este de grande interesse para diversos ramos da indústria que o utilizam com o intuito de prevenir desgastes ou reparar superfícies danificadas de componentes ou partes mecânicas, principalmente aqueles de alto valor agregado (3). O escopo do projeto inclui a utilização de um sistema de bancada baseado em mecanismo de coordenadas XYZ integrado com os sistemas óptico, elétrico, computacional e a própria fonte de laser. No sentido de validar a prova de conceito do princípio proposto, testes de deposição e respectivas análises por inspeção visual direta e microscopia óptica estão sendo realizados em superfícies demasiadamente irregulares de amostras de metais empregando ligas metálicas em pó compatíveis com o substrato.

Palavras-chave: Deposição de metal a laser. Fabricação aditiva a laser. Visão computacional.

Referências:

1 MAJUMDAR, D. J.; MANNA I; Laser processing of materials. **Sadhana**, v.. 28, n. 3 & 4, p. 495–562,2003.

2 TOYSERKANI, E.; KHAJEPOUR, A.; CORBIN, S. **Laser cladding**. Boca Raton,Florida: CRC Press,2000.

3 GU, D. **Laser additive manufacturing of high-performance materials**. Berlin: Springer-Verlag,2015.

PG156

Descoberta de derivados 4-Quinolinonas como candidatos a fármacos aAntimaláricos: caracterização da atividade antiplasmodial In Vitro e ensaios de combinação

de SOUZA, J. O. [1]; ALMEIda, S. M. [2]; AGUIAR, A. C. C. [1]; OLIVA, G. [1]; CORREA, A. [2]; GUIdo, R. V. C. [1]

juliana2.souza@usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Departamento de Química - UFSCar

Com um impacto de cerca de 216 milhões de casos e 445 mil mortes em 2016, a malária é uma doença tropical causada por parasitos do gênero *Plasmodium.* Seu combate depende principalmente de diagnóstico e tratamento medicamentoso rápidos, de forma a eliminar o parasito sanguíneo e reduzir a transmissão da doença pela picada de novos mosquitos. O *Plasmodium falciparum* é o agente causador da forma mais grave da doença, sendo responsável por cerca de 90% das mortes.(1) Nesse contexto, o surgimento de parasitos resistentes às terapias de combinação com derivados de artemisinina (ACTs), primeira linha de defesa contra o *P. falciparum*, é extremamente preocupante, e torna urgente a necessidade de novos antimaláricos efetivos e seguros.(2) Dessa forma, o objetivo do presente projeto é a avaliação *in vitro* e *in vivo* de derivados 4-quinolinonas como candidatos para desenvolvimento de novos antimaláricos, em parceria com o grupo da Profª Arlene Correa, da UFSCar.Desde o início do projeto, foram recebidas 22 4-quinolinonas, as quais foram avaliadas em ensaios fenotípicos de inibição de crescimento do parasito contra cepas sensível (3D7) e resistente (K1) de *P. falciparum in vitro*, além de testes de citotoxicidade em células de hepatócito HepGI ensaios de hemólise em hemácias humanas. Entre esses compostos, oito foram ativos (IC_{50} entre 260 nM e 8 μ) e bem tolerados nos testes de citotoxicidade e atividade hemolítica. Os dois compostos com melhor perfil de atividade e solubilidade, LSPN 178 e 182 (IC_{50} de 470 e 360 nM, respectivamente), foram testados em ensaio de tempo de ação, com base na avaliação do efeito inibitório no parasito ao longo de 24 horas de incubação. Eles demonstraram modo de ação lento, promissor para o desenvolvimento em uma nova ACT pois é indicativo de um mecanismo de ação diferente àquele dos derivados de artemisinina. Esses compostos também foram testados contra o *P. falciparum* em combinação com outros compostos antimaláricos (artesunato, cicloguanil e proguanil). Ambos apresentaram sinergismo quando combinados com o antimalárico proguanil, resultado promissor para uma possível terapia de combinação, e tiveram perfil aditivo com artesunato e cicloguanil. Até o momento, demonstramos que alguns derivados 4-quinolinonas testados possuem alta potência antiplasmodial contra Até o momento, demonstramos que alguns derivados 4-quinolinonas testados possuem alta potência antiplasmodial contra *P. falciparum* (sem indício de resistência cruzada na cepa multirresistente K1), são bem tolerados em células HepG2, possuem modo de ação lento e perfil sinérgico de combinação com proguanil. Assim, essa série é um ponto inicial promissor para o desenvolvimento de novos antimaláricos.

Palavras-chave: Malária. 4-Quinolinonas. Plasmodium falciparum. Citotoxicidade. Antimaláricos.

Referências:

1 ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAUDE. **World Malaria Report 2017**. Geneva: 2017.

2 OUJI, M.; AUGEREAU, J.; PALOQUE, L.; BENOIT-VICAL, F. Plasmodium falciparum resistance to artemisinin-based combination therapies: a sword of Damocles in the path toward malaria elimination. **Parasite,** v.25, p.24,2018.doi: 10.1051/parasite/2018021.

PG157

Triagem virtual em larga escala aplicados na descoberta de novos inibidores da cruzaína e biologicamente ativos na forma amastigota de Trypanosoma cruzi

SOUZA, A. S. [1]
anacletosilvadesouza@usp.br
FERREIRA, L. L. G. [1]
ANDRICOPULO, A. D. [1]
[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A tripanossomíase americana, ou doença de Chagas, é uma arquetípica doença tropical negligenciada e um grande problema de saúde na América Latina. O agente etiológico é o parasita protozoário *Trypanosoma cruzi*. Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), cerca de 7 milhões de pessoas estão infectadas pelo parasita e 25 milhões moram em áreas de risco de contaminação no mundo.(1) A quimioterapia atual é baseada na ação dos fármacos nifurtimox e benzinidazol. Entretanto, eles apresentam efeitos adversos severos (dentre outros, dermatite, neurotoxicidade e hepatite) e não são eficazes na fase crônica da doença. Assim, há urgência no desenvolvimento de fármacos seguros e eficazes para o tratamento da doença. A cruzaína é a principal cisteíno-protease presente nas três formas morfológicas do *T. cruzi*, e está envolvida em diversos eventos biológicos do parasita (i.e., nutrição, reprodução, invasão, reconhecimento, defesa e evasão). Ela apresenta importância clínica e é um alvo validado baseado em estudos *in vitro* e *in vivo*. Embora muitos inibidores apresentem alta potência na enzima, poucos são ativos e/ou seletivos nos ensaios fenotípicos, principalmente na forma amastigota de *T. cruzi*, devido às propriedades farmacocinéticas desfavoráveis.(2) Nesse contexto, foram construídos os modelos de redes neurais artificiais (número de neurônios, pontuação, r^2 e r^2_{pred} de 7, 0,81, 0,81 e 0,81, respectivamente) e KPLS molprint2D (*N*, pontuação, r^2 e r^2_{pred} de 3, 0,82, 0,81 e 0,85, respectivamente) para investigar as propriedades moleculares e estruturais responsáveis pela morte celular do parasita (pIC_{50}). Em seguida, foram aplicados a árvore de decisão aleatória (número de árvores, pontuação, r^2 e r^2_{pred} de 100, 0,88, 0,97 e 0,77, respectivamente) e KPLS radial (*N*, pontuação, r^2 e r^2_{pred} de 4, 0,88, 0,88 e 0,88, respectivamente) para avaliar os aspectos físico-químicos e estruturais que regem a seletividade (pSI). Em seguida, essas informações foram combinadas na triagem virtual em larga escala no banco de dados da ZINC12 *druglikeness (*15,5 milhões de estruturas químicas comercialmente disponíveis). Por fim, as estruturas selecionadas foram filtradas na cavidade enzimática da cruzaína (PDB 3KKU, com resolução de 1,28 Å) por docagem molecular, e posteriormente submetidas aos testes de permeabilidade física em células RRCK, absorção, distribuição, metabolismo, excreção e toxicidade (ADME-Tox). Esse estudo conduziu na descoberta de 260 novos compostos, nas quais os valores de atividade biológica (pIC_{50}), seletividade (pSI) e os pontos de clivagens pelo receptor CYP3A4 foram preditos *in silico*. Dentre os novos compostos, também se destacam os derivados oxadiazólicos, piridínicos e benzimidazóis, nas quais são biologicamente ativos na cruzaína e na forma amastigota de *Trypanosoma cruzi*.(3)

Palavras-chave: Doença de Chagas. Trypanosoma cruzi. Cruzaína. Amastigota. Triagem Virtual.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Chagas disease** (American trypanosomiasis). 2018. Disponível em: </hrefhttp://www.who.int/chagas/en/http://www.who.int/chagas/en/>. Acesso em: 16 ago. 2018.

2 GILBERT, I. H.; LEROY, D.; FREARSON, J. A. Finding new hits in neglected disease projects: target or phenotypic based screening? **Current Topics in Medicinal Chemistry**, v. 11, n. 10, p. 1284–1291, 2011.

3 MARTINEZ-MAYORGA, K. et al. Cruzain inhibitors: efforts made, current leads and a structural outlook of new hits. **Drug Discovery Today**, v. 20, n. 7, p. 890-898, 2015.

PG158

Síntese supramolecular de um cocristal multi-fármaco via mecanoquímica: o caso da 5-Fluorocitosina Isoniazida

SOUZA, M. S. [1]; DINIZ, L. F. [1]; VOGT, L. [1]; CARVALHO J., P. S. [1]; D´VRIES, R. F.[2]; ELLENA, J. [1]

msouza@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Facultad de Ciencias Básicas - Universidad Santiago de Cali

O pró-fármaco antimetabólito 5-Fluorocitosina (5-FC) e o insumo farmacêutico Isoniazida (INH) foram investigados usando os métodos da Engenharia de Cristais a fim de modular a estabilidade física em ambientes úmidos e a susceptibilidade à reações cruzadas, respectivamente. (1 -2) Ademais, visou-se o tratamento concomitante de patologias que têm correlação na prática clínica, tais como: infecções fúngicas, Tuberculose (TB) e câncer de pulmão. A forma anidra da 5-FC é um análogo fluorado da citosina conhecido por sua atividade antifúngica e antitumoral quando células de mamíferos passam por terapia gênica. Durante a manufatura e estoque em condições de umidade variável, este insumo farmacêutico ativo (IFA) pode incorporar de forma irreversível uma molécula de água em sua estrutura cristalina, levando à redução da sua solubilidade e, consequentemente, da sua biodisponiblidade, a qual está atrelada à eficácia terapêutica. A INH, por sua vez, é estável durante longos períodos de tempo em condições aceleradas. Entretanto, quando presente em formulações de dose fixa combinada com outros IFAs do tratamento da TB, torna-se susceptível à hidrólise e à oxidação, interagindo com os outros insumos bem como com os excipientes que compõem o comprimido. Este evento é um gatilho que desencadeia a degradação – agravada com a exposição à luz e à umidade. Assim, este estudo reporta um cocristal de 5-FC obtido a partir da sua reação supramolecular com a INH tanto pelo método de simples evaporação de solvente quanto pelo de moagem por gota de solvente. (3) A amostra foi caracterizada por difração de raios X em monocristal e policristais (DRXM e DRXP), espectroscopia na região do infravermelho (IV) e espalhamento Raman assim como pelas técnicas térmicas de análise termogravimétrica (TG), calorimetria exploratória diferencial (CED) e microscopia termo-óptica (MTO). A estabilidade física da 5-FC, da INH e de seu respectivo cocristal foi avaliada em ambiente com aproximadamente 100% de umidade relativa. A solubilidade no equilíbrio foi medida em meio tamponado a pH 1,2. Dados de IV e Raman forneceram evidências espectroscópicas sobre o envolvimento dos grupos funcionais na manutenção dos principais síntons supramoleculares e do empacotamento cristalino, confirmando assim a natureza neutra do cocristal. Pelas análises térmicas foi possível observar que a amostra apresentou uma preferência pela degradação do que pela mudança da fase sólida para a líquida com o fornecimento de calor, corroborando que as ligações intermoleculares estabilizam esta forma sólida. Adicionalmente, constatou-se que o perfil de solubilidade do cocristal é similar ao IFA de partida 5-FC, um insumo classificado como de classe I pelo Sistema Biofarmacêutico. O cocristal manteve um perfil de solubilidade aceitável e não hidratou ou transicionou de fase sob condições extremas de armazenamento (estabilidade acelerada em atmosfera úmida) e muito menos ao final de 12 meses de estoque (estabilidade a longo prazo), configurando um potencial candidato a aumentar a estabilidade física dos IFAs de partida, evitando indesejáveis hidratações da 5-FC e/ou degradabilidade da INH em remédios que os contenham em suas formulações.

Palavras-chave: 5-Fluorocitosina. Isoniazida. Cocristais fármaco-fármaco. Antimetabólito. Tuberculose.

Referências:

1 GIRON, D.et al. Solid state characterizations of pharmaceutical hydrates. **Journal Thermal Analisis and Calorimetry**, v.68, n.2, p.453–465,2002.

2 SWAPNA, B.; MADDILETI, D.; NANGIA, A. Cocrystals of the tuberculosis drug isoniazid: polymorphism, isostructurality, and stability. **Crystal Growth & Design,** v.14,n.11,p. 5991–6005,2014..

3 SOUZA, M. et al. Mechanochemical synthesis of a multicomponent solid form: the case of 5-Fluorocytosine isoniazid codrug. **Crystal Growth & Design**, 2018.doi: 10.1021/acs.cgd.8b00647.Disponivel em:<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.cgd.8b00647>. Acesso em: 31 ago. 2018.

PG159

Efeitos de agentes entrecruzantes na morfologia e na condutividade elétrica de transistores eletroquímicos orgânicos.

SOUZA, R. F. S. [1]; FARIA, G. C. [1]

rafaelsantiago9485@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O polímero condutor poli(3,4-etileno dióxido tiofeno) com sulfonato de poliestireno (PEDOT:PSS), foi descoberto há 30 anos e hoje está entre os polímeros mais bem sucedidos disponíveis comercialmente. A condutividade elétrica do PEDOT: PSS depende significativamente da morfologia, microestrutura e número de contra-íons que equilibram as cargas positivas de dopagem transportadas pelas cadeias poliméricas conjugadas. No entanto, devido à alta solubilidade de nano-domínios ricos em PSS em água ou outros solventes polares, os filmes de PEDOT: PSS sofrem esfoliação/dissolução quando expostos a tais solventes. (1) Desta forma, agentes entrecruzantes são adicionados aos filmes poliméricos para impedir tal fenômeno, além de conferirem mudanças nas caracteristicas morfológicas e condutivas dos filmes. Esse projeto de mestrado tem como objetivo geral estudar o comportamento de transistores eletroquímicos orgânicos, do inglês, *Organic Electrochemical Transistors* (OECTs), utilizando o polímero PEDOT:PSS como camada ativa. Como tal material é solúvel em água, iremos estudá-lo sob a influência de diferentes agentes entrecruzantes (do inglês, *crosslinkers*), a saber as moléculas 3-glicidiloxipropiltrimetoxisilano, 3-cloropropiltrimetoxisilano, viniltrimetoxisilano, 3-*Metacriloxipropiltrimetoxisilano e 3-Metacriloxipropiltrimetoxisilano.* Uma solução de 10 ml em água do polímero PEDOT:PSS puro foi misturado a 1% em volume do ácido dodecilbenzenossulfônico (DBSA), um agente surfactante que ajuda no processamento dos filmes de PEDOT:PSS. Além disso, foram adicionados na mistura 5% em volume de etileno glicol (EG), material esse que atua aumentando a condutividade do filme polimérico de PEDOT:PSS. Finalmente, uma quantidade de 1% em volume de um dos agentes entrecruzantes, ((3-glicidiloxipropil)trimetoxisilano, 3-cloropropiltrimetoxisilano, viniltrimetoxisilano, 3-*Metacriloxipropiltrimetoxisilano ou 3-Metacriloxipropiltrimetoxisilano)* é adicionada na mistura. Após constante agitação da solução por 1 hora, o PEDOT: PSS é depositado via o método de *spin-coating* em substratos de vidro (dimensões de 2.5 cm x 3.0 cm) que contêm contatos de ouro, formando o canal do transistor. O filme depositado é então aquecido a 120 ^{o}C por 15 minutos e os dispositivos estão prontos para a realização da caracterização elétrica. Os agentes entrecruzantes são necessários para estabilizar o filme de PEDOT:PSS em ambientes aquosos. Tais dispositivos são comumente aplicados em biossensores, que, via de regra, irão interfacear ambientes biológicos ricos em água. Medidas preliminares mostram que filmes de PEDOT:PSS misturado com 3-cloropropiltrimetoxisilano como agente entrecruzante, geram maiores valores de transcondutâncias do transistor (razão *On/Off*). Iremos, portanto, fazer um trabalho metódico de investigação, variando a concentração destes agentes entrecruzantes na mistura de PEDOT:PSS e estudar o impacto desta quantidade na condutividade elétrica do filme. Faremos, também, análises da morfologia do filme de PEDOT: PSS utilizando as técnicas de Microscopia de Força Atômica (AFM), Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X (XPS) e Microscopia de Varredura Eletrônica (MEV) com o intuito de propor um modelo descritivo do aumento ou diminuição da condutividade elétrica do filme de PEDOT: PSS para os diferentes agentes entrecruzantes. Este trabalho tem um impacto direto nas aplicações desses dispositivos em biossensoriamento, já que irá gerar diretrizes de uso e confecção dos filmes de PEDOT:PSS como condutor misto (iônico e

eletrônico).

Palavras-chave: Eletroquímico. Polímero. Crosslinker.

Referências:

1 HAKANSSON, A. et al. Effect of (3-glycidyloxypropyl)trimethoxysilane (GOPS) on the electrical properties of PEDOT:PSS films. **Journal of Polymer Science B**, v. 55, n. 10, p. 814-820, 2017.

PG160

The 3-body problem in classical mechanics with applications to astrophysics and cosmology

TAKEda, C. S. [1]; HARTMANN, B. [1]

carol.takeda@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

The interaction of three bodies according to the laws of gravity, known as "The Three Body Problem", has been studied for about 300 years, starting with Newton. This interaction has no restrictions about the initial velocities and positions of the bodies. Even though it seems to be a simple problem, the solutions are not completely known. (1) Many studies have been made because of its importance for astrophysics and celestial mechanics. There are many applications, such as the study of collisions of galaxies and stars and for spacecrafts missions. This work aims to study the three body problem and apply it in celestial objects. Therefore, the problem will be studied analytically with the use of classical mechanics. Computational simulations will also be used to apply the theory, using real data of celestial objects. (2-3) There are many parameters that can be studied, for example, the stability of the system, collisions, periodic orbits, and many others. The study started with the historical context of the three body problem and an overview of the recent work in the area. At the moment, the stability of the system Sun - Jupiter - Asteroid is been studied, verifying for the asteroids found at the belt between Mars and Jupiter. Finally, more applications will be made in the future.

Palavras-chave: Three body problem. Astrophysics.

Referências:

1 MUSIELAK, Z. E.; QUARLES, B. The three-body problem. **Reports on Progress in Physics**, v. 77, n. 6, p. 065901-1-065901-30, 2014.

2 MACHÍN, R. B. **The three body problem**. Available from: <http://www.uprh.edu/rbaretti/ThreeBodyProb22jun2014.htm>. Acessible at: 11 Sept. 2018.

3 NASA. CALIFORNIA INSTITUTE OF TECHNOLOGY. Jet Propulsion Laboratory. **JPL small-body database**. Available from: <https://ssd.jpl.nasa.gov/sbdb.cgi>. Acessible at: 11 Sept. 2018.

PG161

Recombination dynamics of Landau levels in InGaAs/InP quantum well

TAVARES, B. G. M. [1]; CASTRO, E. D. G. [2]; TEOdoRO, M. D. [2]; LAPIERRE, R. R. [3]; PUSEP, Y. A. [1]
belarmino@ifsc.usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Física - UFSCar

[3] McMaster University - Hamilton, Canada

The advantage of the spectroscopic methods is that it probes the electron states below (photoluminescence) and above (photoluminescence excitation measurements, absorption) the Fermi energy, while the electronic states in close vicinity of the Fermi surface are responsible for the electric transport. As a result, the photoluminescence (PL) emission of the two-dimensional electron gas (2DEG) subjected to a perpendicular quantizing magnetic field directly reveals its fundamental feature – the Landau quantization in a form of the number of PL lines (Landau level fan chart), each corresponding to an appropriate Landau level (LL). Thus, the energy distribution of the one-particle density of states below and above the Fermi energy, the characteristic bandgap energy and the broadening of the electron states involved in the recombination process may be determined. Moreover, the time evolution of the electron states may be studied by time-resolved PL. At appropriately high magnetic field/mobility, the LL states develop into the quantized Hall states corresponding to the incompressible quantum Hall liquids (Hall insulator), which are manifested as the quantized plateau Hall resistance $Rxy = h/ve^2$Rxy=h/ve2 , where vv is the integer LL filling factor. (1-3) Dynamics of differently spin-polarized carriers photo excited in a system of Landau levels is investigated in InGaAs/InP quantum well. Shake-up emission from Landau levels above the Fermi level is observed and it is shown to significantly affect the recombination dynamics of Landau levels. The shake-up effect is found to occur due to the inter-Landau level scattering, which manifests itself in a rapid decay of the emission from Landau levels. In addition, the inter-Landau level scattering is shown to determine the time delay of photoluminescence response due to the relaxation of photo excited electrons among Landau levels. The sharp minimum of the recombination time is observed between the quantum Hall phases with the filling factors $v = 1$v=1 and $v = 2$v=2 , and is attributed to the formation of the metallic intermediate phase which causes increasing overlap between the electron and hole wave functions.

Palavras-chave: Quantum well. Time-resolved photoluminescence. Magneto-optics. Excited states.

Referências:

1 TSUI, D. C.; ALLEN JR, S. J. Localization and the quantized Hall resistence in the two-dimensional electron gas.**Physical Review B**, v. 24, n. 7, p. 4082, Oct. 1981.

2 KIVELSON, S.; LEE, D.-H.; SHANG, S.C. Global phase diagram in the quantum Hall effect. **Physical Review B**, v. 46, n. 4, p. 2223-2238, July 1992.

3 LEE, D. H.; WANG, H.; KIVELSON, S. Quantum percolation and plateau transitions in the quantum Hall effect. **Physical Review Letters**, v. 70, n. 26, p. 4130-4133, June 1993.

PG162
Geração de estados não-clássicos via engenharia dissipativa

TEIZEN, V. F. [1]; MORAES NETO, G. D. [2]; MONTENEGRO, V. [3]; VERNEK, E. [2]

victorfernandesteizen@gmail.com

MOUSSA, M. H. Y. [1]

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Instituto de Física - UFU

[3] Facultad de Física - Pontificia Universidad Catolica de Chile

A geração e proteção de estados quânticos é fundamental para a mecânica quântica. (1) Usualmente, utilizam-se protocolos de produção de estados baseados na aplicação sucessiva de transformações unitárias (2), cuja performance se torna menos efetiva conforme aumenta-se o número de partículas envolvidas nas transformações, além de tornarem-se mais vulneráveis a efeitos de flutuações de parâmetros experimentais, efeitos de desordem, decoerência e ruído. Dentre as possíveis estratégias para gerar estados quânticos, existe a chamada engenharia de interações quânticas, na qual pode-se tanto estudar como alterar a maneira a partir da qual sistemas interagem entre si para produzir um determinado estado estacionário desejado, quanto para investigar propriedades dos estados gerados ao se alterar alguma característica de tal interação. Neste trabalho vamos apresentar uma proposta para gerar estados não-clássicos via engenharia de reservatórios (engenharia dissipativa) em dois tipos de sistemas. No primeiro, utilizaremos um sistema de spins na qual podemos obter estados não-clássicos (emaranhados) para um sistema com o número de partículas (N) entre e 12 via engenharia de interações quânticas com caráter coletivo, para obter diversos estados, considerando efeitos dissipativos como dissipações térmicas e defasagem, além de considerar a robustez com relação a de flutuações em alguns parâmetros experimentais no modelo. No segundo, utilizaremos um sistema optomecânico no qual efetua-se engenharia de dissipação a fim de obter hamiltonianos seletivos com os quais é possível preparar-se estados de Fock sob efeitos dissipativos. Após isso, expandimos nosso método para o caso de um conjunto de células optomecânicas acopladas entre si via pressão de radiação, nas quais utiliza-se um sistema de bombeamento adequado com objetivo de produzir estados emaranhados estacionários.

Palavras-chave: Emaranhamento quântico. Produção de emaranhamento. Comunicação quântica. Computação quântica.

Referências:

1 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

2 MORIGI, G. et al. Dissipative quantum control of a spin chain. **Physical Review Letters**, v. 115, n. 20, p. 200502-1-200502-6, Nov. 2015.

PG163

Analytical methods for determining the existence of non-linear solutions in classical field theory

TOMA, C. E.[1]; HARTMANN, B.[1]

ctoma@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

With the advent of high precision observations of radiation from astrophysical sources it becomes important to understand the difference between different types of ultra-compact objects. The most popular type of ultra-compact objects are black holes, which are predictions of General Relativity, i.e. Einstein's theory of gravitation. However, also other, more exotic possibilities exist, amongst which are so-called boson stars, self-gravitating objects composed out of scalar bosons. These possess – in contrast to black holes – no event horizon and should, in principle, be distinguishable from black holes by future detections of gravitational waves (via the LIGO/VIRGO experiment) or electromagnetic radiation (via e.g. the Event Horizon telescope). In order to make a step forward in the understanding of these signals, we have studied the motion of massive and massless test particles in boson star space-times. The former describe e.g. the motion of low mass objects, while the latter are important both in the understanding of light deflection as well as gravitational wave emission.In this presentation, I will talk about an analytical method for determining the existence of solutions to the Einstein equations in boson star models using elements from the theory of ordinary differential equations (1 -2), The need to turn to such methods arose while studying a scalar-tensor model(3). In the beginning attempts were made to obtain solutions through numerical methods. More precisely a collocation method from the COLSYS program was implemented, with various combinations of parameter values. After extensive testing no solution could be found and so a question arose: does a solution in fact exist and can some information about it be obtained through analytical methods?

Palavras-chave: Boson stars. ODE. Analytical methods.

Referências:

1 SOTIRIOU, T.P.; ZHOU, S. Y. Black hole hair in generalized scalar-tensor gravity: an explicit example. **Physical Review D**, v.90,n.12,p.124063, 2014.

2 BREITENLOHNER, P.; FORGACS, P.; D. MAISON,D. Static spherically symmetric solutions of the Einstein-Yang-Mills equations. **Communications in Mathematical Physics**, v.163, n.1,p.141-172,1994.

3 WIGGINS,S. **Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos**. New York: Springer Verlag, 2003.

PG164

Investigação das metodologias de produção de Taq DNA polimerase Hot Start e suas implicações nos custo e atividade da enzima

TORRES, N U. [1,2]; COSTA, F. C. [2]; BERNARdeS, A. [1,2]; OLIVA doTTA, M. A. V. [1,2]; MALUF, F. V. [1,2]; GUIdo, R. V. C [1]

naiara.utimura@gmail.com

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[2]Cellco Biotec do Brasil LTDA

A reação de polimerização em cadeia (do inglês, PCR) é uma técnica amplamente usada em laboratórios de biologia molecular, análise forense, diagnóstico clínico e controle de qualidade em indústrias alimentícias. Taq DNA polimerase de *Thermus aquaticus* é a enzima mais amplamente usada na PCR por sintetizar DNAs de diversos tamanho e natureza, além de manter sua atividade em diferentes meios reacionais. Apesar disso, essa enzima pode apresentar amplificações inespecíficas e formação de dímeros de oligonucleotídeos devido à sua atividade residual em temperatura ambiente, na qual a maioria das reações é preparada. (1) Para solucionar esse problema, foram desenvolvidas Taq DNA polimerases que somente são ativadas após uma incubação em alta temperatura (do inglês, *Hot Start Taq DNA polymerase*). Essas enzimas são usualmente ligadas à biomoléculas ou grupamentos químicos que impedem a sua atividade a temperatura ambiente. Com a incubação em altas temperaturas, ou ciclo *Hot Start*, as biomoléculas e grupamentos químicos se desligam da DNA polimerase, que recupera a sua atividade. (2-3) Apesar de muito utilizada, não existe produção nacional de Taq DNA polimerase no Brasil, fazendo com que o valor e a disponibilidade dessa enzima sejam variados. Dessa forma, o presente trabalho – realizado em colaboração com a empresa Cellco Biotec do Brasil LTDA – visa a produção de Taq DNA polimerase *Hot Start* de alta qualidade pela combinação de técnicas de mutagênese, ligação à anticorpo/aptâmero, reação com grupamentos químicos e precipitação de íons divalentes do meio reacional. Para isso, Taq DNA polimerase foi produzida heterologamente em *Escherichia coli* e teve seu processo de purificação otimizado por uma combinação de métodos cromatográficos. Visando avaliar a atividade enzimática, um método de determinação de unidades de DNA polimerase foi desenvolvido baseado na fluorescência de intercalante de DNA. A Taq DNA polimerase *Hot Start* pela ligação de aptâmero foi produzida e teve sua atividade *Hot Start* demonstrada por reação realizada em temperatura ambiente e avaliada em termociclador de tempo real. Diluições do aptâmero de fita simples de DNA foi realizada para obter-se a menor concentração de aptâmero necessária para obtencao de Taq DNA polimerase *Hot Start*. Definidos os protocolos de produção e avaliação da atividade enzimática, os próximos passos desse trabalho serão a produção e a comparação de Taq DNA polimerases *Hot Start* nacionais e de alta qualidade por meio da ligação de anticorpos, grupos químicos, mutação e precipitação de íons da solução.

Palavras-chave: Taq DNA polimerase Hot Start. DNA. PCR.

Referências:

1 ISHINO,S; ISHINO,Y. DNA polymerases as useful reagents for biotechnology - the history of developmental research in the field. **Frontiers in Microbiology**, v. 5, n. 465, p. 1-8, 2014.

2 KERNEKCHIEV, M. B.; TZEKOV, A.; BARNES, W. M. Cold-sensitive mutants of Taq DNA polyme-

rase provide a hot start for PCR. **Nucleic Acids Research**, v. 31, n. 21, p. 6139-6147, 2003.

3 WU, E. Y. et al. A conservative isoleucine to leucine mutation causes major rearrangements and cold sensitivity in KlenTaq1 DNA polymerase. **Biochemistry**, v. 54, n. 3, p. 881-889, 2015.

PG165
Formulação de quarks para a QCD na rede

VISCARDI, L. A. M. [1]; MENdeS, T. [1]

leandro.viscardi@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente projeto propõe o estudo da cromodinâmica quântica (QCD) através de simulações numéricas da teoria na rede. Mais precisamente, estamos preocupados com o cálculo de propagadores fermiônicos e espectro de massa para hádrons (que está associado com a combinação de propagadores fermiônicos) com dois sabores de quarks leves degenerados. As simulações estão sendo realizadas na aproximação quenched, na qual são negligenciados os efeitos de quarks virtuais. Essa aproximação é muito utilizada em simulações de QCD, pois o peso de loops fermiônicos é esperado ser pequeno, além do fato de uma simulação completa ser consideravelmente mais complicada em todos os aspectos, construção de algoritmos e peso computacional. Deste modo, neste projeto estão sendo explorados vários procedimentos que são utilizados nas simulações de QCD em geral, desde a construção de configurações de gauge até a inversão do operador de Dirac (corresponde ao propagador fermiônico). Em particular, para a inversão do operador de Dirac em que é uma tarefa crucial neste projeto, estão sendo utilizados os métodos BiConjugate Gradient Stabilized (Bi-CGSTAB) e a expansão de hopping, no qual também estamos comparando os seus resultados. (1-3)

Palavras-chave: Quarks. QCD. Rede. Hopping.

Referências:

1 ROTHE, H. J. **Lattice gauge theories**: an introduction. 4th ed. Singapore: World Scientific, 2012. (World scientific lecture notes in physics, v. 82).

2 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice**: an introductory presentation. Berlin: Springer-Verlag, 2010. (Lecture notes in physics, v. 788).

3 BARRETT, R. et al. **Templates for the solution of linear systems**: building blocks for iterative methods. 2nd ed. Philadelphia: Siam, 1994.

PG166

Análise topológica da densidade de carga eletrônica teórica em sistemas periódicos

WANdeRLEY, A. B. [1]; CLAVIJO, J. C. T. [1]; SOUZA, M. S. [1]; CAMPS, I. [2]; ELLENA, J. [1]

adilson.wanderley@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

[2] Departamento de Física - UNIFAL

Propriedades físico-químicas de insumos farmacêuticos ativos (IFAs) em estado sólido dependem de seu arranjo tridimensional. Estes arranjos são caracterizados, principalmente, pela polaridade de seus grupos funcionais e suas ligações intra e intermoleculares. Sua compreensão permite interpretar a interação de grupos farmacofóricos e receptores, governados pelas propriedades eletrônicas e moleculares. (1) O planejamento de formas sólidas, obtenção e caracterização dos IFAs são etapas multidisciplinares que se complementam sob os princípios da Engenharia de Cristais. A distribuição de carga eletrônica no espaço direto $\rho(\boldsymbol{r})$, é um observável físico que pode ser estudado por meio da difração de raios X em monocristal de alta resolução, e provê informação das propriedades eletrônicas moleculares tais como: a estabilidade das ligações químicas (covalentes e iônicas), campo elétrico e potencial eletrostático, entre outros. Cálculos teóricos da densidade de carga molecular em cristais podem ser realizados utilizando a teoria do Funcional da Densidade (*DFT*) aplicada a sistemas periódicos. A análise topológica desta densidade, do ponto de vista da mecânica quântica, tem como base a Teoria Quântica de Átomos em Moléculas de Bader (*QTAIM*). (2) Esta análise permite os cálculos das bacias atômicas assim como dos pontos críticos. As propriedades eletrônicas, como Gradiente e Laplaciano da densidade de carga, assim como os autovalores do Hessiano nos pontos críticos, determinam as propriedades físico-químicas das ligações e interações intermoleculares. Neste contexto, o objetivo deste projeto de pesquisa foi o de caracterizar propriedades eletrônicas de sólidos farmacêuticos utilizando o cálculo teórico da densidade de carga. Dados da densidade de carga eletrônica experimental de um cocristal fármaco-fármaco (3) foram utilizados como referência para a realização de estudos por meio do pacote de softwares *CRYSTAL14*. Nesta etapa foram utilizados diferentes níveis de teoria assim como diferentes *Basis Set* para encontrar a melhor relação custo computacional/descrição topológica quando comparados os resultados com os obtidos experimentalmente.

Palavras-chave: Análise topológica. Densidade de carga. Cocristal fármaco-fármaco. DFT. QTAIM.

Referências:

1 DEVI, R. N., et al. Charge density analysis of metformin chloride, a biguanide anti-hyperglycemic agent. **Acta Crystalographyca B**, v. 73, n. 1, p. 10-22, 2017.

2 BADER, R. F. W. **Atoms in molecules**: a quantum theory. Oxford: Clarendon Press, 1990. (International series of monographs on chemistry, 22).

3 SOUZA, M. S. et al. Mechanochemical synthesis of a multicomponent solid form: the case of 5-fluorocytosine isoniazid codrug. **Crystal Growth and Design**, 2018. doi: 10.1021/acs.cgd.8b00647. In press.

PG167
Single molecule transport phenomena through one nanopore

ZAGO, L. A. [1]; GUIMARÃES, F. E. G. [1]

leandro.zago@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

With advances in nanofabrication techniques, the necessary refinement has been achieved for new devices to emerge and allow the observation of phenomena involving a single molecule. In this way, the polymethyl methacrylate (PMMA) polymer will be used as the material for the production of thin films (of the order of 100nm) by spin-casting technique. A controlled nanometric pores will be produced by the beam technique (FIB) which consists of accelerating heavy ions to the energies of a few tens of KeV and focusing them on a target. It will also be used an electrolytic cell, where measurements of transport phenomena will be made, such as the diffusion of a single protein (1) through the membrane, where characteristics such as diffusion speed, length of the molecule and its conformation will be observed, using the flow variation of current as the molecule travels through the nanopore. These new devices capable of observing the transitions of the isolated molecules through the nanopore will be functionalized (2), so that a current-rectifying response can be obtained through asymmetric pores (3) using the deposition of surface charges, aiming at the creation of ultra-sensitive sensing devices for certain proteins for the detection of diseases in the early stages quickly and cheaply.

Palavras-chave: Nanopore. Thin film. Single molecule.

Referências:

1 MOAZED, B.; HASHEMI, M.; ACHENBACH, S. Novel PMMA polymer-based nanopores capable of detection and discrimination between structurally different biomolecules. **IEE Sensors Journal**, v. 14, n. 9, p.3292-3309, 2014.

2 PLETT, T. S; et al. Solid-state ionic diodes demonstrated in COnical nanopores. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 121, n. 11, p. 6170-6176, 2017.

3 TAN, S. et al. Detection of a single enzyme molecule based on a solid-state nanopore sensor. **Nanotechnology**, v.27, n. 15, p.155502-1-155512-11, 2016.

PG168

Imobilização de FS em superfícies poliméricas aplicadas a área médico-hospitalar

ZANGIROLAMI, A. C. [1]; BLANCO, K. C. [1]

zangirolami.amanda@gmail.com

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A capacidade dos micro-organismos formarem biofilmes em superfícies pode afetar diretamente a saúde do homem. A formação de biofilme microbiano pode ocorrer em superfícies como em tubos de água, ar condicionado, dispositivos médicos como endoscópios, cateteres e tubos endotraquais (TE). (1) Pacientes debilitados por causas diversas como traumas e insuficiência respiratória podem ser portadores do TE. Este tubo é instalado na traqueia e facilita a troca gasosa no organismo debilitado. Na superfície deste tubo endotraqueal, células bacterianas, gram positivas ou negativas, podem se anexar e formar colônias, desenvolvendo assim, um biofilme. Essas células formam uma matriz extra polimérica (EPS) que protege as colônias contra agentes externos. A Pneumonia Associada a Ventilação Mecânica (PAV) pode ocorrer entre 48 a 72h após a instalação do TE no paciente. (2) *Staphylococcus aureus* é a principal bactéria que causa esta doença, a qual apresenta linhagens resistentes a antibióticos. A resistência microbiana faz parte do processo evolutivo de adaptação destas células. Uma das estratégias para combater as infecções hospitalares é a inativação fotodinâmica. A terapia utiliza uma molécula fotossensível, luz e oxigênio celular. O fotossensibilizador, na presença da luz e oxigênio pode formar espécies reativas de oxigênio que levam a célula a morte. Não existe relatos que esta terapia cause resistência microbiana, sendo assim uma alternativa ao insucesso de alguns antibióticos. A curcumina, derivada da Curcuma longa, é uma molécula natural, hidrofóbica e que apresenta propriedades antioxidantes, antimicrobianas, antiinflamatórias e antitumorais com absorção de luz na região de 430 nm. (3) O presente estudo combina o uso da inativação fotodinâmica associada a molécula de curcumina para a eliminação de biofilme de *S. aureus* desenvolvidos em superfícies poliméricas, como o TE. Métodos diversos foram testados para inativar o biofilme. Curcumina em solução, nebulizada e em formulações como hidrogel, filme, nanoskin foram sintetizados e testados no biofilme. Após a otimização da concentração da curcumina, tempo de incubação e dose de energia total necessária da irradiação, o trabalho encaminha como intuito de imobilizar a curcumina e outros FS no TE e em outras superfícies poliméricas para evitar a contaminação em materiais médico-hospitalares e desenvolver uma iluminação própria para irradiar o paciente sem interferir na rotina médica. Testes toxicológicos serão realizados para alcançar os testes pré-clínicos e clínicos para que o tubo e outros materiais imobilizados possam ser utilizados em pacientes acamados, evitando o desenvolvimento de infecções e reduzir o uso de antibióticos, evitando assim o aumento da população bacteriana resistente a agentes antibióticos.

Palavras-chave: Biofilme. Imobilização. Fotossensibilizadores. Luz.

Referências:

1 LINDSAY, D.; von HOLY, A. Bacterial biofilms within the clinical setting: what healthcare professionals should know. **Journal of Hospital Infection**, v. 64, n. 4, p. 313-325, Dec. 2006.

2 BOWTON, D. L. et al. The impact of hospital-wide use of a tapered-cuff endotracheal tube on the incidence of ventilator-associated pneumonia. **Respiratory Care**, v. 58, n. 10, p. 1582-1587, 2013.

3 MONDAL, S.; GHOSH, S.; MOULIK, S. P. Stability of curcumin in different solvent and solution media: UV-visible and steady-state fluorescence spectral study. **Journal of Photochemistry and Photobiology B**, v. 158, p. 212-218, 2016. doi: 10.1016/j.jphotobiol.2016.03.004.

PG169

Caracterização e análise evolutiva de introns mínimos em platelmintos.

ZUVANOV, L. [1]; de MARCO, R. [1]

luizazuvanov@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos - USP

A descoberta da descontinuidade gênica, estabelecida por regiões intrônicas e exônicas no material genético, e a posterior predição do processo de excisão e junção de sequências de DNA ocasionou grande mudança no âmbito da genômica evolutiva. A descrição do processo, denominado splicing, foi acompanhado de indagações quanto às causas para seleção de genomas com vastas regiões intrônicas. Entretanto, aos introns, até então referidos como "junk DNA", foi lhes atribuído inúmeras atividades, tais como: regulação de expressão gênica e confecção de novos genes. Todavia, ainda não é sabido inteiramente como essas regiões se caracterizam e quais processos evolutivos atuam em sua configuração. (1) Em um estudo do genoma do platelminto Schistosoma mansoni, constatou-se o enriquecimento de regiões intrônicas de tamanho médio de 34pb próximos a região 5' UTR. Contudo, a razão para a tendência observada não é conhecida, bem como sua história evolutiva. (2) Em outros organismos, é possível também observar o favorecimento de introns cujo tamanho se aproxima de um mínimo, sendo nomeados de introns mínimos. (3) No platelminto cestoda Echinococcus multilocularis, entretanto, viu-se que a distribuição de introns mínimos ocorre de forma bimodal, com picos em torno de 34pb e 73pb. Supõe-se que a ocorrência de determinados introns mínimos, presente em diversos ramos evolutivos, derive de pressões seletiva semelhantes. Entretanto, há de se questionar a relação entre as populações de introns observadas singularmente em S. mansoni e bimodalmente em E. multilocularis, assim como as diferenças nas faixas de comprinto de introns mínimos preferenciais que variam conforme espécie. Buscando um melhor entendimento da estrutura destes introns, foram calculadas a frequência de nucleotídeos e a entropia informacional das pontas 5' e 3' de cada população de introns mínimos de S. mansoni e de E. multilocularis, comparando-os com introns de tamanho normal analisados pelos mesmos parâmetros. Foi observado que a população de introns mínimos aparenta seguir o modelo canônico de definição de introns, com a presença de nucleotídeos GU e AG nas extremidades 5' e 3' respectivamente. Nota-se, no entanto, que introns mínimos apresentam quantidade de informação significativamente menor que introns normais próximos a esta região, sugerindo possíveis diferenças no seu mecanismo de reconhecimento. Temos como perspectiva investigar se existem correlações entre o tamanho mínimo em introns e o conteúdo de nucleotídeos na sua vizinhança, bem como a possibilidade de formação de estruturas secundárias importantes para a efetivação do splicing. Espera-se que estes dados ajudem a elucidar a natureza dos introns mínimos, visando melhor compreensão da arquitetura e evolução de genomas.

Palavras-chave: Introns mínimos. Schistosoma mansoni. Echinococcus multilocularis.

Referências:

1 JO, B.-S.; CHOI, S. S. Introns: the functional benefits of introns in genomes. **Genomics and Informatics**, v. 13, n. 4, p. 112-118, Dec. 2015.

2 BERRMIAN, M. et al. The genome of the blood fluke Schistosoma mansoni. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 352-358, July 2009.

3 YU, J. et al. Minimal introns are not “junk". **Genome Research**, v. 12, n. 8, p. 1185-1189, Aug. 2002.

PG170

Estudo comparativo da compressibilidade isotérmica de um gás bosônico via modelos de variáveis globais e aproximação de densidade local

MARTINS, E. B. [1]; TELLES, G. D. [1]

ed_uspi1@usp.br

[1] Instituto de Física de São Carlos- USP

Gases quânticos degenerados apresentam amplas possibilidade de estudos nas mais diversas áreas da física. Em particular, nosso grupo de Física Atômica e Molecular vem se destacando na investigação de turbulência quântica e termodinâmica com variáveis globais, ao longo dos últimos anos. No caso da termodinâmica realizaremos um estudo comparativo de resultados de algumas suscetibilidades termodinâmicas, determinadas via dois modelos: a) o modelo das variáveis globais [2], (GV, do inglês) e b) o modelo da aproximação da densidade local [1], (LDA, do inglês). A capacidade térmica e a compressibilidade isotérmica, são típicas suscetibilidades que deverão ser estudadas e comparadas nos dois modelos . No caso de um condensado típico, não homogêneo, a densidade de número n(r), varia espacialmente. Assim espera-se que a termodinâmica clássica não seja adequada para tratar corretamente esses sistemas. Surgiu então um modelo baseado numa aproximação na densidade local que permite o estudo de sistemas não homogêneo,para determinar valores de grandezas termodinâmicas localmente. Com isso se obtém n(r) e a equação de estado, a partir das quais obtém-se as suscetibilidades, entre outras possíveis quantidades de interesse.Mais recentemente, surgiu o modelo de variáveis globais que se baseia na determinação de dois parâmetros conjugados principais: o de volume (Ω - 3) e o de pressão (π), harmônicos. O objetivo principal do projeto é determinar as suscetibilidades, de acordo com os dois modelos independentes, GV e LDA, procurando analisar as semelhanças e diferenças entre os resultados obtidos para um gás bosônico de condensado.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Termodinâmica. Suscetibilidades.

Referências:

1 NASCIMBÈNE, S. et al.The equation of state of ultracold Bose and Fermi gases: a few examples. **New Journal of Physics**, v. 12, p. 103026-1-103026-14, Oct. 2010. doi: 10.1088/1367-2630/12/10/103026.

2 ROMERO-ROCHÍN, V. R.; BAGNATO, V. S. Thermodynamics of an ideal gas of bosons harmonically trapped: equation of state and susceptibilities. **Brazilian Journal of Physics**, v. 35, n. 3A, p. 607-613, Sept. 2005.

PG171

Análise de imagens de fluorescência na detecção de doenças de soja

SBRISSA, D. A. [1] ; MILORI, D. M. B. P. [2]

sbrissa@ifsc.usp.br

[1]Instituto de Física de São Carlos - USP

[3]InMBRAPA Instrumentação de São Carlos

Nos últimos anos, pesquisas tem mostrado a eficáncia de técnicas de fluorescência como fator de indício da presença de patógenos externos em planta. No presente trabalho, busca-se avaliar a capacidade de diagnóstico de plantas assintomáticas acometidas pelo nematóide causador da doença Haste Verde e Retenção Foliar (HVRF), através da técnica de fluorescência. Para tal, foi proposto o desenvolvimento controlado da HVRF em plantas de soja, realizando-se periodicamente, medições da fluorescência de suas folhas, quanto excitadas com um comprimento de onda de 405 nm. Esse ensaio foi realizado no mês de janeiro de 2018 com 60 plantas de soja, das quais 30 foram inseridas nematóides da doença HVRF, enquanto as demais forma mantidas sadias. Foram realizadas 10 coletas – sendo cada coleta correspondente à extração de uma folha de cada planta –, no periodo de um mês, até as plantas doentes se tornassem sintomáticas. De posse das folhas, foram obtidas imagens e espectros de fluorescência das mesmas. Os equipamentos utilizados nessa etapa estão localizados nas dependências da EMBRAPA Instrumentação. Destacam-se duas instumentações utilizadas: Fluorescência Induzida por Laser (FIL) e Imagem de Fluorescência induzida por LED (LED-IFI). Para obtenção das imagens foram utilizadas duas câmeras fotográficas distintas, uma câmera de resolução média e uma comercial de resolução maior. O tratamento e processamento dos dados seguiu os protocolos tradicionais já consolidados na área. A classificação baseada em espectros utilizou os valores normalizados dos comprimentos de onda de saída do espectrômetro. Já a classificação baseada em imagens seguiu o procedimento padrão: pré-processamento, segmentação, extração de atributos, seleção de atributos, classificação e validação. (1) Destaca-se os atributos de textura, onde foram exploradas técnicas como *Haralick*, *Wavelet* e *Local Binary Pattern*, além dos atributos de coloração, com cor dominante e frequência relativa. Para a classificação dos grupos sadio e assintomático, foi utilizado o algoritmo *Suppport Vector Machine* com otimização de parâmetros de força-bruta com *GridSearch*. Por fim, a validação foi feita com 33% do grupo de dados como teste. A matriz de confusão foi gerada pelo método k-fold para k = 10. (2) A validação cruzuda revelou elevado grau de acurácia para as técnicas testadas. A predição do conjunto de teste para a instrumentação FIL teve uma acurácia de 81,1%. Ja os mesmos resultados para a instrumentação de imagens foram levemente superiores, com valores para a câmera PointGray© de 85,7% e para a câmera Sony© de 96,4%. Sendo assim, conclui-se que as três instrumentações de fluorescência são capazes de detectar a presença da HVRF com valores significativos de acurácia, ainda em estágio assintomático. Ênfase para a instrumentação LED-IFI com a câmera Sony, que mostrou os maiores valores de acurácia, tendo potencial então, de tornar-se uma ferramenta de inspeção agrícola para soja.

Palavras-chave: Soja. Diagnóstico precoce.Ffluorescência. Reconhecimento de padrões.

Referências:

1 DA FONTOURA COSTA, L.; CESAR JR, R. M. **Shape analysis and classification:** theory and

practice. New York: CRC Press, 2010.

2 BISHOP, C. M. **Pattern recognition and machine learning**.Singapore: Springer, 2006.

PG172

Interaction of water with the phospholipid head group studied by molecular dynamic simulations

HERNANdeZ-SARRIA,J. J. [2]; OLIVEIRA J., O. N.[1]; MEJIA-SALAZAR, J. R.[1]

jhon.hernandez@ifsc.usp.br

[1]Instituto de física de São Carlos - USP

[2]Intituto Nacional de Telecomunicações - INTEL

We studied here the interaction of phospholipid Langmuir monolayers with water molecules. Results were obtained through molecular dynamics (MD) simulation, which is a classical chemistry computational approach to study complex large molecules. This technique is based on the solution of Newton's equations for all the molecules in the system to predict some of the physical properties of biomolecular systems. (1) In particular, we used the software GROMACS with the Martini force field .(2), based on a four-to-one mapping (four heavy atoms are represented by a single interaction center), to consider the interaction of phospholipids with water. Numerical data is further used to explain the experimental results for surface pressure isotherms and to estimate the monolayer surface potential. (2) In future work, we will study possible breakage of the monolayer, which is highly desired for drug engineering intended to act against super-resistant bacteria. The interaction between the phospholipid molecules in the membrane and some selected pharmaceutical drugs will be investigated to determine drug location in the membrane and whether the monolayer integrity is preserved, which is crucial to verify if surfactants can be used as drug carriers. (3) The possible disruption of the monolayer, on the other hand, is desired for drugs aimed at acting against super-resistant bacteria.

Palavras-chave: Molecular dynamics simulatio. Martini force field. Langmuir monolayers.

Referências:

1 GUPTA, S.; VARADWAJ,P. K. A brief overview on molecular dynamics simulation of biomolecular system:procedure, algorithms and applications. International **Journal Pharmaceutical of Science Research**, v.9, n.9, p.1333-50,2018.

2 BERKOWITZ, M. L.; VACHA, R.Aqueous solutions at the interface with phospholipid bilayers. **Accounts of Chemical Research**, v.45, n.1, p.74-82, 2012.

3 MARRINK, S. J. et al. The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations. **Journal of Physical Chemistry B**, v.111,n.27, p.7812-7824, 2007.,n.27, p.7812-7824, 2007.

Índice de Autores

A
ACOSTA, V. 299
AGUIAR, A. C. C. A. 104, 113, 349
AKAMATSU, D. Y. 31
AKCELRUD, L. 184
ALMEIDA FILHO, H. A. de. 118
ALMEIDA, G. F. B. 116
ALMEIDA, J. M. P. de 39, 46, 116, 299
ALMEIDA, L. R. de 204, 351
ALMEIDA, N. S. de 32, 83, 140
ALMEIDA, S. M. 104
AMARANTE, A. M. 120
AMORIM, D. R. B. 122
ANDRADE, E. de C. e 61, 130
ANDRADE, M. B. de 53, 183, 246, 306, 318
ANDRADE, R. de A. P. 160
ANDRICOPULO, A. D. 64, 93, 250, 301, 347
AOKI, P. H. B. 226
APRILE, N. P. 123
ARAKAKI, H. 356
ARAÚJO, A. P. U. de 87, 158, 262, 274
ARAÚJO, E. A. de 128
ARAÚJO, R. do N. 130
ARAUJO, A. T. de 58
ARAUJO, F. L. de 126
ARAUJO, G. D. 124
ARAUJO, H. S. 357
ARBELETCHE, L. 131
ARGENTIN, M. N. 133
ARTHUZO, G. 135
ASSIS, P. 255
ATENCIO, D. 246
AURICHIO, V. H. 137
AZEVEDO, É. C. de 138

B
BACHELARD, R. P. M. 68, 191
BADAN, L. da C. 140
BAGNATO, G. de G. 142
BAGNATO, V. S. ..48, 52, 65, 86, 92, 135, 193, 209, 215, 223, 228, 236, 265, 270, 293, 340
BALOGH, D. T. 67, 318
BARBANO, E. C. 212, 346
BARRETO, D. L. 143

BARROS, A. 215
BARROS, I. de A. 33
BASSO, L. G. M. 327
BASTOS, C. M. de O. 144, 150
BATISTA, R. da F. M. 145
BELLINI, N. K. 147
BELTRAMINI, L. M. 59
BENATTI, A. 149
BERNARDI, J. C. 85, 260
BESSE, R. 144, 150
BEVILAQUA, J. L. B. 215
BIRAL, E. J. P. 153
BLANCO, K. C. 52, 100, 293
BOITO, D. R. 37, 289
BONAGAMBA, T. J. 164, 296, 354
BORALLI, C. M. S. 154
BOSSOLAN, N. R. S. 133, 180
BOTELHO JUNIOR, M. V. 37
BRIGANTI, L. E. R. P. P. L. D. B. 156
BRITO, F. B. de 33, 102, 242, 252, 256, 366
BROGNARA, G. 158
BRUNELLI, R. 160
BRUNO, O. M. 118, 249, 325
BUENO, R. V. 290
BUKZEM, A. de L. 297
BUZZÁ, H. H. 48, 135

C
CAETANO, J. 307
CAFACE, R. A. 74, 161
CALVELLO, V. S. 35
CAMAPANA FILHO, S. P. 297
CAMARGO, A. S. S. de 115, 194
CAMARGO, I. L. B. C. 58, 109, 216
CAMPOS, C. de P. 163
CANCINO-BERNARDI, J. 244, 310
CÂNDIDO, D. R. 174
CARACANHAS, M. A. 223
CARDOSO, C. 101, 164
CARVALHO JUNIOR, P. de S. 189
CARVALHO, A. L. 49
CARVALHO, L. F. 166
CASARIN, R. L. 78
CASSAGO, A. 202, 262
CASTILHO, P. C. M. 65, 265
CASTRO NETO, J. C. de 36, 60, 73, 78, 86, 106, 110, 215, 258
CATURELLO, N. A. M. S. 150

CAVALHEIRO, E. T. G. 62
CAVALLINI, D. 36
CAVASSIN, P. 167
CAVINI, Í. A. 168
CERINI, M. F. 170
CERVINI, P. 62
CESARINO, V. 172
CEZAR, J. C. 278
CLEMENTINO, L. O. D. 38
COCCA, L. H. Z. 175, 213
COELHO, F. B. 305
COLUCCI, R. 177
COMIN, C. H. 42
CONCEIÇÃO, R. 255
CONSOLE, F. 178
CORRADINE, G. 39
CORREA, A. G. 104
CORREIA, A. R. 179
CORREIA, C. R. D. 113
COS, P. A. 215
COSTA, F. C. 362
COSTA, G. C. 180
COSTA, G. G. da 59
COSTA, J. V. I. 174
COSTA, L. da F. 42, 201, 211
COSTA, R. G. L. 40
COSTA, Y. A. da 182
COURTEILLE, P. W. 47
COURTENAY, J. C. 297
CRUZ, A. R. 153
CRUZ, C. G. C. 183
CUBGA, G. 184
CUCCHIERI, A. 137, 166
CUSTODIO, J. M. F. 213

D

D'ALMEIDA, C. de P. 186
D'AMICO, I. 369
DA SILVA, M. T. A. 154
DAGHOFER, M. 285
DANCIÃES, I. 188
DE BITTENCOURT, H. P. 152
DE BONI, L. 107, 112, 175, 213, 253
DE GROOTE, M. C. R. 216
DE SOUZA, V. 255
DEAZEVEDO, E. R. 40, 45, 184, 242
DEFFUNE, E. 270

DEOLIVEIRA, M. L. B. 137
DIAS, R. 175
DINIZ, L. F. 189, 351
DOBRIGKEIT, C. 255
DOMINGUES, G. S. 42
DONATO, M. H. F. 43
DONOSO, J. P. 188
DRESSLER, B. 44
DUQUE, H. V. 65

E
EGUES, J. C. 153, 174
ELLENA, J. A. 53, 55, 189, 246, 368
ESPIRITO SANTO, T. S. do 191
EVANGELISTA, D. E. 192

F
FALVO, M. 305
FARIA, C. M. G. de 193
FARIA, G. C. 167, 177
FARIA, R. C. 71
FARIA, R. M. 67, 122, 126
FARIA, W. 194
FARIAS, K. 265
FENERICK, R. 45
FERNANDES, A. 196
FERNANDES, A. A. C. 79
FERNANDES, A. de F. 327
FERREIRA, A. G. A. 296
FERREIRA, F. 197
FERREIRA, L. A. 245
FERREIRA, M. 255
FERREIRA, P. R. 46
FERREIRA, S. J. V. 201
FERREIRA, T. A. 199
FILGUEIRAS, J. 40, 242
FLORES, G. A. 182
FLOREZ ARIZA, A. J. 202
FOERSTER, B. U. 164
FONSECA, A. L. M. da 147
FONSECA, M. B. da 250
FONSECA, R. D. 213
FONTANARI, J. F. 208
FORTULAN, C. A. 164
FORTUNATO, T. C. 205
FRANCA, E. de F. 120
FRANCISCO, L. H. 206
FRANCO, C. 208

FRANKLIN, L. C. 47
FREGNANI, J. H. T. G. 49
FREITAS, L. C. F. de 48
FREITAS, L. C. G. 120
FRITSCH, A. 209
FURUTA, R. H. M. 49

G
GALANTE, D. 170, 199
GALDIANO, M. D. B. 50
GARBUIO, M. 52
GARCÍA, A. 209
GARCIA, C. R. 349
GARCIA, G. S. 53
GARRATT, R. C. 168, 238, 262
GERALDE, M. C. 228
GETELINA, J. C. 210
GEWERS, F. L. 211
GODOY, A. 281
GODOY, A. S. 294
GOMES, J. A. C. 212
GOMES JUNIOR, F. G. 254
GONÇALVES, D. 49, 62, 90, 224
GONÇALVES, L. 55
GONÇALVES, P. J. 253
GONÇALVES, R. V. 89
GOTARDO, F. 175, 213
GOVONE, A. B. 215
GRAEBIN, C. S. 250
GUEDES-SOBRINHO, D. 150
GUERRA GIRALDEZ, D. 202
GUESSI, L. H. 218
GUIDO, R. V. C. 79, 104, 113, 229, 290, 294, 349, 362
GUIMARÃES, F. E. G. 74, 161, 258, 270, 297, 303, 312
GUTIERREZ, E. D. M. 65

H
HARTMANN, B. 123, 178, 359, 361
HENN, E. A. de L. 88
HENRIQUE, F. R. 220
HERNANDES, A. C. 206
HIGASI, P. 221
HIROTA, L. da C. B. 32
HORJALES, E. 216
HOYOS, J. A. 210
HUAMANI CHAVIGURI, J. R. 223

I
IBÁÑEZ-REDÍN, G. G. 49, 224
IERICH, J. C. M. 120
IGLESIAS, B. A. 175
INADA, N. M. 52, 163, 193, 228, 236, 329
ISRAEL, I. 225

J
JO, J. 314
JOCHELAVICIUS, K. 226
JOHNS, M. A. 297

K
KADOWAKI, M. A. S. 192, 221, 281
KALBITZER, H. R. 168
KARASAWA, E. G. 56
KASSAB, G. 228
KATEKAWA, E. 229
KLEIN, A. K. 58
KRÜGER, A. L. 230
KUBOTA, T. M. K. 232
KUNITAKE, P. Y. 59
KURACHI, C. 103, 163, 193, 215, 312, 314

L
LACHINI, N. 234
LANG, R. G. 235
LEITE, F. de L. 120
LEITE, I. S. 236
LEONARDO, D. A. 238
LIMA, A. L. de 240
LIMA FILHO, J. B. de 243
LIMA, G. M. A. 290, 294
LIMA, J. F. R. 79
LIMA, M. P. 150
LIMA, R. B. B. 242
LINS, P. 244
LIVRAMENTO, L. R. 245
LOPES, G. A. de C. 246
LOPES, L. 255
LORDELLO, V. D. 248
LUCCAS, G. A. A. 60
LUZ, R. 255
LYLES, Z. 236

M
M'PEKO, J. C. 89
MACHICAO, J. 249

MAGALHÃES, A. B. 232
MAGALHÃES, K. M. F. 65
MAGALHÃES, L. G. 64, 93, 250, 301
MAGNO, G. F. 61
MAGON, C. J. 188
MAIA, L. P. 124, 225, 271
MALAVAZI, A. H. A. 252
MALUF, F. V. 290, 294, 349, 362
MANOEL, D. da S. 253
MANZANI, D. 188
MANZINE, L. R. 128
MARASSI, A. G. 254
MARCASSA, L. G. 72, 302
MAREGA JÚNIOR, E. 31, 38, 266
MARION, S. C. F. 62
MARTINS, C. T. 64, 93
MARTINS, G. F. 256
MARTINS, L. M. 63
MARTINS, M. 305
MARTINS, M. J. 336, 345
MARTINS, R. J. 116
MARTINS, V. B. 255
MASCARENHAS, S. 160
MASCARENHAS, Y. P. 329
MATERÓN, E. M. 71
MATIAS, P. 336
MATOS, L. de 36, 73, 106
MATTOS, V. S. 36, 258
MAZO, P. L. 65
MEDONCA, C. R. 116
MELENDEZ, M. E. 49
MELHADO, M. S. 66
MELO, C. C. 260
MELO, C. C. de 189
MELLO, B. L. 192
MENDES, T. C. R. 166, 234, 367
MENDONÇA, C. R. 46, 220, 253, 299, 318, 364
MENDONÇA, D. C. 262, 274
MENEGHELLO, R. 263
MENEZES, L. P. 264
MERCADO, E. G. 265
MESQUITA, A. 95
MESQUITA, G. M. 213
MEYER, M. 307
MIGUEZ, M. L. 268
MILORI, D. M. B. P. 230, 232, 307
MION, W. M. 270

MIRANDA, G. da S. 67
MIRANDA, M. M. P. 266
MIRANDA, P. B. 243
MISOGUTI, L. 66, 212, 268, 346
MOLINARI, J. 184
MONTALVÃO, R. W. 333
MONTEIRO, V. M. 271
MONTENEGRO, V. 357
MONTESSO, M. 188
MONTRAZI, E. T. 101
MORAES, A. de S. 120
MORAES NETO, G. D. de 357
MORAES, R. R. D. de 272
MORAES, T. B. 45
MORAIS, S. T. do B. 262, 274
MORAZOTTI, N. A. da C. 276
MOREIRA, N. A. 68
MORGADO, F. F. 278
MORI, T. J. A. 278
MORIYAMA, L. T. 103, 186, 205
MOULS, C. L. 278
MOUSSA, M. H. Y. 286, 315, 341, 357
MULINARI, E. J. 279
MUNIZ, A. B. 362
MUNIZ, J. R. C. 196, 204, 279
MUNIZ, S. R. 32, 35, 43, 83, 97, 98, 140, 299
MUNTE, C. E. 168
MURANO, A. 184
MURANO, M. 184

N
NAKADA, P. J. T. 70
NAKAMURA, A. M. 281
NALIN, M. 188
NAPOLITANO, H. B. 213
NAPOLITANO, R. de J. 276
NARDI, L. M. C. 283
NASCIMENTO, A. F. 238
NASCIMENTO, A. S. 138, 281, 287, 344
NASCIMENTO, G. F. do 36, 71
NATORI, W. M. H. 285
NAVARRO, J. C. A. 65
NAVARRO, M. V. de A. S. 263, 331
NAZARIO, N. R. 83, 140
NEVES, N. I. de S. 73, 106
NEVES, R. F. de O. 72
NICOLODELLI, G. 230

NIRO, C. M. 74
NOBRE, D. A. 76
NOBRE, T. M. 226
NOGUEIRA, V. H. R. 287

O
OLIANI, F. H. 289
OLIVA, G. 113, 290, 294, 333, 349
OLIVEIRA, A. A. 290
OLIVEIRA, B. P. de 293
OLIVEIRA, D. D. de 79
OLIVEIRA, E. L. 164, 296
OLIVEIRA, G. D. C. 213
OLIVEIRA, I. M. 292
OLIVEIRA JUNIOR, O. N. de 49, 62, 71, 120, 224, 226, 343
OLIVEIRA, K. I. Z. de 294
OLIVEIRA, L. N. de 218, 369
OLIVEIRA, L. O. de 78
OLIVEIRA, M. T. 347
OLIVEIRA NETO, F. de 286, 357
OLIVEIRA NETO, M. de 327
ONCEBAY, C. 299
ONO, B. A. 297
OTA, I. N. N. 300
OTUKA, A. J. G. 318

P
PAIVA, F. F. 32, 50, 82, 83, 101, 108, 140, 164, 182, 264, 292, 334
PALOMINO-SALCEDO, D. L. 301
PANCIERA, M. 113
PAOLILLO, F. R. 36, 60, 78, 86, 258
PASSAGEM, H. F. 302
PENTEADO, P. H. 153
PEREIRA, D. M. B. 323
PEREIRA, H. 196
PEREIRA, M. L. 80
PEREIRA, R. D. 81
PEREIRA, R. G. 285
PEREZA, C. N. 213
PESSOA, V. H. de M. 82
PIIADOV, V. 128
PIMENTA, M. 255
PINCERATO, K. 215
PINTO JUNIOR, F. F. 303
PINTO, R. D. 172
PIZETTA, D. C. 82, 96, 305
POLIKARPOV, I. 128, 156, 192, 221, 281
PORTUGAL, R. V. 202, 262

POUSSEP, I. 360
PRADE, R. A. 279
PRATAVIEIRA, S. 92, 186, 312
PUSEP, Y. A. 356

Q
QUEIROZ, A. A. A. E. de 53, 306
QUIBAO, M. P. 83, 140

R
RAM, S. 297
RAMOS, M. L. 215
RANULFI, A. C. 307
RAYMUNDO-PEREIRA, P. A. 343
REPOILA, I. 216
REYES, G. M. 85
RIBEIRO, C. C. H. 309
RIBEIRO, O. R. 86
RIBOVSKI, L. 310
RODRIGUES, E. L. L. 182
RODRIGUES, F. 170
RODRIGUES, F. A. 338
RODRIGUES, J. E. F. S. 206
RODRIGUES JUNIOR, J. J. 116
ROMANO, R. A. 92, 103, 312
ROMUALDO, L. L. 213
RONQUI, J. R. F. 142, 313
ROSA, H. V. D. 87
ROSA, R. G. T. 215, 314
ROSSETTI, R. F. 315, 357
RUGGIERO, C. A. 197, 336
RUSSOWSKY, D. 64, 93

S
SÁ, A. A. de C. 354
SABINO, F. P. 144
SALAS, O. I. A. 318
SAMPAIO, R. P. 319
SANCHES, E. A. 329
SANTANA, F. T. 317
SANTOS, A. L. 329
SANTOS, B. N. 88
SANTOS, D. M. 297
SANTOS, E. F. S. 113
SANTOS, E. R. dos 321
SANTOS, F. E. 317
SANTOS, G. C. 58, 109
SANTOS, L. F. L. S. 89

SANTOS, M. H. 90
SANTOS, N. F. 92
SANTOS, T. 320
SBRISSA NETO, D. A. 323
SCABINI, L. F. S. 325
SCHIO, P. 278
SCHNEIDER, J. F. 76
SCORTECCI, J. F. 196, 327
SCOTT, J. L. 297
SEGATO, F. 279
SEGURA, C. O. O. 35, 97, 98
SENESI, G. S. 307
SERIDONIO, A. C. 218
SERRÃO, V. H. B. 196, 327
SERROR, P. 216
SHIMIZU, F. M. 71
SILVA, A. C. 83, 140
SILVA, C. C. 145, 283
SILVA, C. C. P. da 351
SILVA, D. M. D. D. da 334
SILVA, E. E. D. 331
SILVA, E. M. G. 64, 93
SILVA, F. N. 42
SILVA, G. M. R. da 95
SILVA, G. R. da 329
SILVA, J. L. F. da 144, 150
SILVA JUNIOR, J. T. da 336
SILVA, L. de C. R. da 96, 305
SILVA, M. T. A. da 80, 240
SILVA NETO, A. M. da 333
SILVA, P. C. V. da 338
SILVA, P. F. 35, 97
SILVA, R. A. de S. 98
SILVA, R. M. A. A. 83, 140
SILVA, T. P. da 321
SILVA, W. J. G. da 204
SIPAHI, G. M. 81, 144, 150
SIQUEIRA, J. P. 116
SMAIRA, A. de F. 340
SOARES, J. M. 100
SOARES, P. M. S. B. 341
SOARES-PINTO, D. de O. 143, 242
SOLCIA, G. 101
SOUSA, E. P. M. de 72
SOUSA, G. de 102
SOUSA, L. M. de C. 67
SOUSA, M. A. M. 343

SOUSA, S. C. 344
SOUZA, A. S. de 347
SOUZA, C. A. 356
SOUZA, D. G. B. 120
SOUZA, G. de 103
SOUZA, G. E. 349
SOUZA, J. O. de 104
SOUZA, J. P. 44
SOUZA, L. M. de 52
SOUZA, L. R. F. de 349
SOUZA, L. V. de 149
SOUZA, M. A. A. de 258
SOUZA, M. da S. 351
SOUZA, P. V. B. D. de 305, 345
SOUZA, R. F. S. de 73, 106
SOUZA, T. G. B. de 346
SOUZA, V. de 56, 131, 235
SOUZA, W. F. de 107
STELMASTCHUK, L. B. F. 353

T
TANNÚS, A. 152, 254, 305, 345
TAVARES, B. 356
TEIZEN, V. F. 357
TELLES, G. D. 209, 340
TEODORO, M. do C. 359
THIEMANN, O. H. 80, 147, 154, 240, 319, 320, 327, 353
TITO, M. 356
TITO, M. A. 360
TOMA, C. 361
TOMAZINI JÚNIOR, A. 70
TOMAZIO, N. B. 318
TONIN, Y. R. 108
TORRES, B. B. M. 67
TORRES, N. U. 294, 362
TRAVIESO, G. 142, 197, 313
TREVIZAN, W. 296
TUJERA, G. A. 364
TUK, A. P. 317

U
URIU, M. B. 128
USON, I. 238

V
VALADARES, N. F. 238
VANZELLA, D. A. T. 300, 309
VARGAS-GRAJALES, J. A. 366

VECCHI, M. 63, 248
VENTURINE, F. P. 52
VERNEK, E. 153, 357
VIDOTO, E. L. G. 152, 305, 345
VIEIRA, N. C. S. 179
VILLAS-BOAS, P. R. 232, 272
VISCARDI, L. A. M. 367
VIVERO-ESCOTO, J. L. 236
VIZIOLI, H. T. 110
VIZOTTO, M. E. 109

W
WANDERLEY, A. B. 368
WATANABE, A. 307
WESTIN, R. G. 112
WETTERICH, C. B. 72
WILLBOLD, D. 168
WILSON, D. M. 49

Y
YASUOKA, F. M. M. 258

Z
ZANINI, C. L. 113
ZAVAN, R. A. 115
ZAWADZKI, K. 369
ZÍLIO, S. C. 212, 346
ZUCOLOTTO, V. 44, 179, 244, 260, 310

PATROCÍNIO

Agilent Technologies

THORLABS

SERFLEX

APOIO

SBIifsc

IFSC JUNIOR

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos