

Nona Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Monday 05 August 2019 - Friday 09 August 2019

Book of Abstracts

seguida, por meio da técnica de engenharia de reservatório, construímos sua equação mestra reduzida para a cavidade. Exibimos a comparação entre os Hamiltonianos e também suas equações mestra, além do histograma e representação no espaço de fase do estado obtido.

Subárea:

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

Sim Referências:

- 1 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, Dec. 1996.
- 2 JAMES, D. F.; JERKE, J. Effective hamiltonian theory and its applications in quantum information. **Canadian Journal of Physics**, v. 85, n. 6, p. 625-632, 2007.
- 3 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having PT symmetry. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 24, p. 5243-5246, June 1998. **Área:**

Física Básica

306

Identificação e caracterização de novos agentes moduladores de microtúbulos com propriedades antitumorais

Author(s): Carolina Teixeira Martins^{None} ; Ellen M. Giliotti Silva^{None}

Co-author(s): Luma G. Magalhães ; Eduardo B. Mass ; Dennis Russoswky ; Adriano D. Andricopulo

Corresponding Author(s): carolina.teixeira.martins@usp.br

O câncer é um conjunto de doenças ocasionadas pela proliferação descontrolada de células anormais do organismo.(1) A terapia atualmente disponível, apesar de vasta, apresenta limitações como alta toxicidade e baixa biodisponibilidade.(2) Além disso, há o desenvolvimento de mecanismos de resistência aos fármacos existentes no mercado.(3) Nesse contexto, o desenvolvimento de terapias mais seguras e eficazes se faz necessário. Com o objetivo de identificar e caracterizar novas moléculas com propriedades anticâncer, cujo alvo molecular é a proteína tubulina, três séries de compostos (chalconas; dihidropirimidinonas e híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas) foram avaliadas em ensaios celulares e bioquímicos empregando a linhagem tumoral MDA-MB-231 e saudável (HFF1). A citotoxicidade dos compostos foi investigada em células tumorais e a capacidade de inibição da migração celular por meio de ensaios qualitativos (wound healing) e quantitativos (câmara de Boyden) foi determinada. Os efeitos dos compostos sobre a organização do citoesqueleto e da cromatina foram investigados por meio de estudos de imunofluorescência. A capacidade dos compostos em modular a proteína tubulina foi avaliada a partir do ensaio in vitro de polimerização da tubulina e o estudo da progressão do ciclo celular e caracterização dos danos causados pela ação dos compostos foi realizada pela técnica de citometria de fluxo. Inicialmente, uma triagem com 15 representantes das três classes químicas estudadas permitiu a identificação de 12 compostos ativos cujos valores de CC50 (concentração citotóxica em que 50% das células estão inviáveis) variaram entre 3 e 15 μM . Os menores valores de CC50 foram apresentados pelos híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas. Para avaliar a seletividade dos compostos, a citotoxicidade contra uma linhagem não tumoral foi paralelamente estudada. Os híbridos de dihidropirimidinonas-chalconas mostraram-se mais citotóxicos enquanto as chalconas se mostraram mais seletivas. Ademais, a maioria dos compostos mostraram-se eficientes moduladores da tubulina e capazes de interromper o ciclo celular na fase G2/M. Pretende-se, ainda, avaliar quantitativamente a seletividade dos compostos por meio da determinação de CC50 desses contra a linhagem de células saudáveis HFF1. Os resultados obtidos indicam que as séries estudadas apresentaram hits interessantes para o planejamento e síntese de novos ligantes promissores da proteína alvo.

Subárea:

Cristalografia **Apresentação do trabalho acadêmico para o público geral:**

Sim Referências:

- 1 INSTITUTO NACIONAL DO CANCER. Disponível em: <https://www.inca.gov.br/>. Acesso em: 10 jun. 2019.

2 STUURMAN, F. E. et al. Oral anticancer drugs: mechanisms of low bioavailability and strategies for improvement. **Clinical Pharmacokinetics**. v. 52, n. 6, p. 399-414, 2013.

3 MANSOORI, B. et al. The different mechanisms of cancer drug resistance: a brief review. **Advanced Pharmaceutical Bulletin**, v. 7, n. 3, p. 339-348, 2017. **Área:**

Física Aplicada a Biomolecular

266

Implementação de uma criptografia de stream baseada na equação do K-mapa logístico

Bruno Larsen^{None}

Corresponding Author(s): bruno.larsen@usp.br

O objetivo principal desse projeto de iniciação científica é testar a ideia de usar um k-mapa logístico (1) como gerador de números aleatórios para um sistema de criptografia baseado na criptografia OTP. Esse gerador em específico foi escolhido por apresentar boas qualidades como PRNG e altíssima velocidade. A velocidade, a qualidade e a viabilidade do sistema foi avaliada durante a pesquisa. Nesse trabalho foi implementado uma classe de criptografia em c++ usando uma biblioteca de precisão arbitrária para iterar o mapa logístico. A criptografia se dá por somar o valor (em ascii) do caractere a ser criptografado com o valor aleatório gerado pelo k-mapa logístico e tirar o módulo 256 do resultado. O valor aleatório foi obtido de 2 maneiras: Usando a metodologia normal do k-mapa (1), em que o novo estado é multiplicado por 10^k e tem a parte inteira removida, ou usando o que chamamos de i-mapa logístico, em que o novo estado é multiplicado por 2^i e tem a parte inteira removida. A segunda opção foi escolhida por poder aumentar a velocidade em sistemas computacionais. A qualidade da criptografia foi avaliada usando o TestU01 (2) e a velocidade foi avaliada usando o comando `\textit{time}` do linux para encriptar um arquivo de 2.7Gb. Os testes de qualidade não apresentaram diferença com a mudança do cálculo do gerador aleatório, mas sim com a mudança do parâmetro. Foi descoberto que valores entre 8 e 20, inclusive, apresentam boas propriedades. A velocidade também não apresenta muita variação, fazendo as 2 possibilidades serem igualmente rápidas, precisando de aproximadamente 22 minutos para encriptar o arquivo, dando uma média de 2Mb/s.

Subárea:

Ressonância Magnética e Caos **Apresentação do trabalho acadêmico para o público geral:**

Não Referências:

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

2 L'ECUYER, P.; SIMARD, R. TestU01: A C library for empirical testing of random number generators. **ACM Transactions on Mathematical Software**, v. 33, n. 4, p. 22-1-22-40, 2007. **Área:**

Física Aplicada a Computação

272

Implementação e manutenção de código computacional em framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores

Ian Giestas Pauli^{None} ; Guilherme Matos Sipahi¹

¹ Instituto de Química de São Carlos

Corresponding Author(s): sipahi@ifsc.usp.br, iangiastas@usp.br