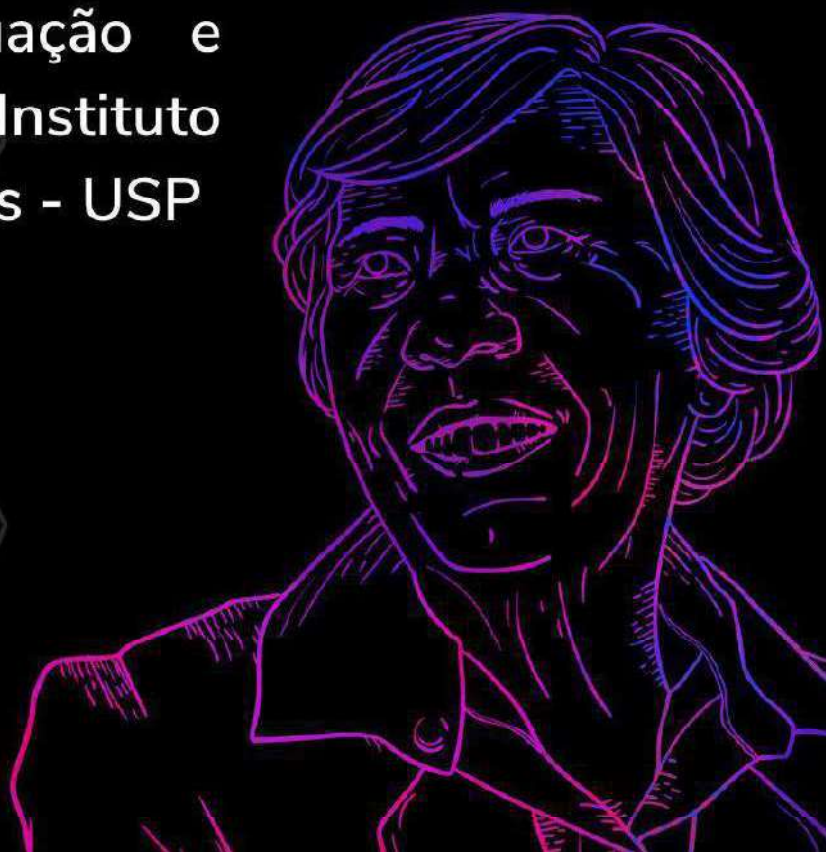


SIFSC 12

LIVRO DE RESUMOS

Décima Segunda Semana
Integrada da Graduação e
Pós-Graduação do Instituto
de Física de São Carlos - USP

2022



Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2022

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

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

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

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

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

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

Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettems

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jeffer Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

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 Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São
Carlos: IFSC, 2022.

445 p.

Texto em português.

1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4

CDD: 530

Carta de apresentação

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

Como de costume, uma das principais atrações da SIFSC é o Workshop da Pós-Graduação, já em sua 26ª 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 30º 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 a uma banca com representantes de todas as grandes áreas de pesquisa do instituto.

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

Comissão Organizadora da SIFSC 12

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Desenvolvimento de Cavidade Laser Ti:Safira Femtossegundos PINTO, V. P.; CASTRO NETO, J. C.; YASUOKA, F. M. M.; NOGUEIRA, G. T.	33
IC2 - Classificação de autômatos celulares através de redes neurais FABRIS, V.	34
IC3 - Elaboração de um catálogo de imagens de vasos sanguíneos para o treinamento de algoritmos de aprendizado de máquina SANTOS, N. C. ; COMIN, C. H.	35
IC4 - Modelando o conhecimento por redes complexas. FONSECA, M.; COSTA, L. F.; BENATTI, A.; ARRUDA, H. F.	36
IC5 - Desenvolvimento de nanoestruturas de ouro para modulação da intensidade de emissão de nanomateriais luminescentes SANTOS, G.	37
IC6 - Desenvolvimento de circuito de controle em sistema para aplicação e monitoramento da terapia fotodinâmica de câncer de pele do tipo não melanoma CARVALHO, F. A.	39
IC7 - Desenvolvimento de nanoestruturas de g-C₃N₄ à partir da pirólise da ureia: estudo da atividade fotocatalítica para geração de H₂ verde MARCELINO, G. B. S.; GONÇALVES, R. V.	40
IC8 - Estudo do processo de incubação na microfabricação com pulsos de femtossegundos em GaN FERMIANO, B.; MENDONÇA, C. R.; TASSO, K.	41
IC9 - Implementação e manutenção de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores PAULI, I. G. ; SIPAHI, G.	42
IC10 - Quebra de invariância de Lorentz: diferença de tempo de voo entre dois fótons em um universo em expansão SOUZA FILHO, L. V.; MUNDO, T. L.	44

IC11 - Elaboração de um Catálogo de Imagens de Vasos Sanguíneos para o Treinamento de Algoritmos de Aprendizado de Máquina SANTOS, N. C. ; COMIN, C. H.	45
IC12 - Busca indireta de matéria escura com o Cherenkov Telescope Array MAMPRIM, J. G. ; SOUZA FILHO, L. V.	46
IC13 - Investigação de derivados de quinazolininas com propriedades anticâncer COSTA, F. R. F. ; SOUZA, M. S.	47
IC14 - Triagem de compostos bioativos em linhagem tumoral metastática de próstata RAFAEL, L. D. D. ; SOUZA, M. S.	49
IC15 - Avaliação de compostos em patógenos bacterianos multirresistentes como parte do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos - CIBFar VILLEFORT, G. ; CAMARGO, I. L. B. C.	51
IC16 - Estudo de processos dinâmicos em meios porosos por RMN e técnicas físico-computacionais CAMPOS, N. ; BONAGAMBA, T. ; OLIVEIRA, É. L.	52
IC17 - Engenharia de Band-Gap de Nb₂O₅ para evolução fotocatalítica de H₂ com luz solar simulada ZAMPAULO, L. G. T.; GONÇALVES, R. V.....	54
IC18 - Processos de magnetização em magnetos frustrados CAPELO, G.	55
IC19 - Physarum polycephalum: um modelo biológico de inteligência coletiva ARRUDA, J. F. Z.	57
IC20 - OccultIn - A web interface based on SORA PIMENTA, J. V. A. ; ROSSI, G. B. ; BOUFLER, R. C. ; FRAIZ, M. O. ; SILVA, M. B. ; ROSSI, P. F.	58
IC21 - O método de Monte Carlo variacional aplicado a núcleos leves TONHON, R.	60
IC22 - Busca por anisotropias nas direções de chegadas de raios cósmicos ultra-energéticos BRUZAO, G. L.....	61
IC23 - Estudos de modelagem molecular para a descoberta de potenciais inibidores da enzima PI4KIIIβ de Plasmodium falciparum: triagem virtual e métodos de aprendizado de máquina OLIVEIRA, G. S. ; NOGUEIRA, V. H. R.	62

IC24 - Cálculo de espectros de fotoemissão por grupo de renormalização numérico no espaço real LENZARINI, M. ; OLIVEIRA, L. N.	64
IC25 - Estudos ópticos espectroscópicos lineares e não lineares em uma nova classe de porfirinas NASCIMENTO, C. S. ; BONI, L.	65
IC26 - Medida do índice de refração não-linear em vidros ópticos INACIO, A. C. C. ; MENDONÇA, C. R.	67
IC27 - Obtenção da curva de dispersão do índice de refração do espectro de transmissão em interfaces de materiais transparentes ACOSTA, I. ; MISOGUTI, L.	68
IC28 - Absorção multifotônica em perileno BARBEDO, A. ; PELOSI, A. ; VALVERDE, J. V. ; OSPINA, O. M.	69
IC29 - g-2 com um modelo para $R(s)$ MANSUR, L. M. ; BOITO, D. R.	70
IC30 - Similaridade genética de estreptococos do grupo B isolados de humanos na Paraíba TORINI, L. ; PEREZ, V. P. ; DINIZ, P. S. ; SILVA, L. R. S. ; QUEIROZ, S. B. ; GOMES, J. I. A. B. ; LUNDGREN, P. U. ; SANTOS FILHO, L. ; CAMARGO, I. L. B. C.	71
IC31 - Modelagem matemática do movimento de forrageio do <i>Physarum polycephalum</i> FLORENTINO, B. R. ; FONTANARI, J. F.	73
IC32 - Desenvolvimento de reator para monitoramento in situ dos parâmetros de reação e emissão de quantum dots ROSA, M. B. ; CAMARGO, A. S. S.	74
IC33 - Prospecção teórica para a otimização do método da Razão de Intensidade de Luminescência em Termometria Óptica QUADROS, T. ; BERNARDEZ, A. S. S. C. A.	76
IC34 - Buscando matéria escura com raios gamma de alta energia RAMOS, M. E. M. ; VIANA, A. E. M.	77
IC35 - Avaliação da atividade antibacteriana da luz ultravioleta em solução nutritiva de hidroponia. CORREA, B. C. ; PEREZ, S. M. L. ; BAGNATO, V. S.	78

IC36 - Estudo da absorção de dois fótons em derivados fluorescentes de Benzotiadiazol: determinação da magnitude do brilho AKIYAMA, J. ; LIMBERGER, J. ; BONI, L.	79
IC37 - Sistemas de spins interagentes: resultados na rede quadrada e nos aproximantes de quase-cristais MIRALHAS, V. S. ; ANDRADE, E.	81
IC38 - Espectroscopia óptica e resolvida no tempo de porfirina base livre contendo átomos de platina e paládio: possível aplicação em microbiologia CROCE, J. N. ; IGLESIAS, B. A. ; GARCIA, R. ; BONI, L.	83
IC39 - Estudo de fluxo de fluidos em meios porosos digitais utilizando técnicas físico-computacionais SELLIN, D. ; FERREIRA, A. G. A. ; BONAGAMBA, T. J.	85
IC40 - A cooperação na evolução pré-biótica MARIANO, M. S. ; FONTANARI, J. F.	87
IC41 - Introdução à teoria dos espinores e twistores PÊGAS, J. V. ; VANZELLA, D. A. T. ; FERREIRA, C. H. G.	89
IC42 - Evolução fotocatalítica do CO₂ sob emissão de luz UV - visível em nanopartículas de BiVO₄ produzidas via síntese hidrotermal VIEIRA, G. N. ; GONÇALVES, R. V.	90
IC43 - Investigação dos efeitos de curvatura no estado fundamental de um condensado de Bose-Einstein dipolar em uma armadilha de casca esférica YELISETTY, K. ; HENN, E. A. L.	91
IC44 - Estudos de reações relevantes para a astrofísica usando o Brazilian Nuclear Potential CESSEL, G. ; GASQUES, L. R.	93
IC45 - Estudos de espectroscopia óptica estacionária e resolvida no tempo em novas moléculas de corróis base livre FRANÇA, D. ; BONI, L.	94
IC46 - Desenvolvimento e validação de biossensores portáteis e de baixo custo à base de anticorpos/antígenos MAIA, G. ; GONÇALVES, D. ; MATERÓN, E. M.	96
IC47 - Produção de guias de ondas volumétricas com pulsos de femtossegundos TRANZIL, V. T. R.; MENDONÇA, C. R.	98

IC48 - Remoção de ruído em sinais e imagens por ressonância magnética utilizando Transformada Wavelet OLIVEIRA, C. J. ; PAIVA, F. F.....	99
IC49 - Remoção de ruído em sinais e imagens por ressonância magnética HENRIQUE, R. ; PAIVA, F. F. ; SOLCIA, G.....	100
IC50 - Sub-radiância em nuvens de átomos frios AZZAR, P. R. S. ; BACHELARD, R. P. M.....	102
IC51 - O método de Monte Carlo variacional aplicado a núcleos leves TONHON, R. ; MADEIRA, L.....	103
IC52 - Estudo de rochas reservatório por Ressonância Magnética Nuclear em condições de perfilagem de poços de petróleo SILVA, E. S. ; MARASSI, A. G. ; BONAGAMBA, T.....	104
IC53 - Desenvolvimento da parte mecânica da cavidade laser Ti:Safira Femtossegundo GIROTO, V. ; YASUOKA, F. M. M. ; CASTRO NETO, J. C.....	105
IC54 - Processamento de sinais para o estudo de meios porosos por Ressonância Magnética Nuclear em condições de perfilagem de poços de petróleo KUL, J. O. ; BONAGAMBA, T. ; FERREIRA, A. G. A.....	106
IC55 - Avaliação do FAR-UVC 222 nm na descontaminação e aumento do tempo de prateleira de frutas. DELFINO, M. ; ALVES, F. ; CORREA, T. ; PRATAVIEIRA, S.	108
IC56 - Desenvolvimento e aplicação de nanofármacos a partir do reposicionamento de agentes terapêuticos contra a Covid-19 SILVA, J. ; ZUCOLOTTI, V. ; BERNARDI, J. C.	110
IC57 - Otimização da terapia Sonofotodinâmica mediada pela Curcumina contra biofilme de Pseudomonas aeruginosa CARVALHO, I. ; ALVES, F. ; BAGNATO, V. S. ; PRATAVIEIRA, S.	111
IC58 - Avaliação das propriedades fotoantimicrobianas de revestimentos fotossensíveis: potencial aplicação na descontaminação de produtos cárneos LOPES, L. K. B. C. ; DIAS, L. D.	112
IC59 - Fabricação de guias de ondas com pulsos de femtossegundos em vidros não lineares VIEIRA, E. V. M. ; MENDONÇA, C. R.....	114

IC60 - Dispositivos detectores de radiação de alta energia baseados em compósitos vítreos cintiladores YAMASSHIRO, A. ; JESUS, V. D. ; LODI, T. A. ; MERIZIO, L. G. ; BERNARDEZ, A. S. S. C. A.	115
IC61 - Terapia fotodinâmica antimicrobiana com uma nanoemulsão de porfirina e seu efeito na presença do surfactante pulmonar TOME, A. J. ; KURACHI, C. ; BUZZÁ, H.	117
IC62 - Nanopartículas luminescentes dopadas com íons lantanídeos para aplicação em sensores químicos e biológicos VASCONCELOS, L. ; ARAI, M. S. ; BRAMBILLA, G. V. ; CAMARGO, A. S.	119
IC63 - Avaliação de técnicas de RMN de ^1H no domínio do tempo para realização de experimentos de crioporometria. TREBBI, B. ; AZEVEDO, E. R.	120
IC64 - Estudo da interação da melanina com ultrassom de baixa intensidade SOUZA, M. O. ; AYALA, E. T. P. ; OLIVEIRA JUNIOR, M. ; PRATAVIEIRA, S.	122
IC65 - PVT: uma ferramenta de visualização computacional para identificação de Amebas de Vida Livre ISSA, M. ; BELLINI, N. K. ; OLIVEIRA, D. C. ; THIEMANN, O.	124
IC66 - Estudo estrutural da CDK9 humana e sua interação com ligantes por técnicas de baixa resolução OLIVEIRA, B. L. ; CANDURI, F.	126
IC67 - Development and application of nanopharmaceuticals from the repurposing of therapeutic agents against Covid-19: mucus-modulation studies. PEDRIZ, I. S. ; ZUCOLOTO, V. ; FERREIRA, L. M. B. ; LEITE, A. E. T. ; LEITE, C. M. ; MIRANDA, R. R. ; CARDOSO, V. M. O. ; NADDEO, N. N. F.	128
IC68 - Incorporação do Gálio em vidros bioativos: novas relações estruturais/funções descobertas por técnicas de RMN de estado sólido GOMES, Y. H. F. ; ECKERT, H.	130
IC69 - Avanços na aplicação e monitoramento da terapia fotodinâmica ARAUJO, F. ; CARVALHO, F. ; GARCIA, M. ; PRATAVIEIRA, S.	132
IC70 - Cálculo da densidade de estados através dos métodos marching cubes e marching tetrahedra MAZZIERO, M. L. ; SIPAHI, G. M.	133

IC71 - Estudo da fotodegradação da curcumina na presença do iodeto de potássio para inativação microbiana CRUZ, S. T. ; BAGNATO, V. S. ; PRATAVIEIRA, S. ; ALVES, F.	134
IC72 - Interação entre nanopartículas de fuligem em diferentes ambientes: um estudo das mudanças das características ópticas e suas consequências PRADO, A. P. G. A. ; VICENTE, M. L. F. ; GUIMARAES, F. E. G.....	136
IC73 - Síntese e caracterização de tintas de PEDOT:PSS: impacto dos parâmetros de síntese na condutividade elétrica do material. CASTRO, B. S. ; HIGUITA, G. D. G. ; FARIA, G.	137
IC74 - Effect of milling time on structural properties of TiO₂ : a study by Raman spectroscopy VIANA, J. V. S. ; HUAMAN, J. L. C.	139
IC75 - Processamento de dados na espectroscopia Raman MILITAO, L. ; ELLENA, J. A.	140
IC76 - Cadeia de Kitaev e Majorana nanowire: propriedades topológicas e espectrais SANTOS, J. G. O. ; PENTEADO, P. H. ; MENEZES, J. C. E.	141
IC77 - Junções NS com supercondutores topológicos COSTA, J. P. C. ; MENEZES, J. C. E. ; PENTEADO, P. H.....	142
IC78 - Expressão e purificação do complexo ZIKV NS2B-NS3 protease para triagem de candidatos antivirais DOLCI, I. ; NOSKE, G. D. ; SILVA, E. S. ; FERNANDES, R. ; OLIVA, G.....	143

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Aplicações de redes complexas e ferramentas de geometria computacional em sistemas dinâmicos BISPO JUNIOR, A. G. ; BRUNO, O. M.....	145
PG2 - Uma visão sobre sistemas biológicos, comportamentos dinâmicos presentes na natureza e caoticidade BISPO JUNIOR, A. G. ; PETROVSKII, S. ; BRUNO, O. M.	146

PG3 - A complexidade quântica na presença de correção e prevenção de erros quânticos HILARIO, A.	147
PG4 - Reconciliando a dissipação não linear com o modelo bilinear para duas partículas Brownianas GOETTEMES, E. I. ; PINTO, D. S. ; VALENTE, D. M. ; AFONSO, R.	149
PG5 - Using one- and two-photon absorption effects for molecular first-order hyperpolarizability dispersion measurements in organic molecules SCIUTI, L. ; ABEGAO, L. ; COCCA, L. Z. ; SANTOS, C. H. D. ; COSTA, R. ; LIMBERGER, J. ; MISOGUTI, L. ; MENDONÇA, C. ; BONI, L.	150
PG6 - Estudo da interação entre filamentos de septinas MENDONÇA, D. C. ; PORTUGAL, R. V. ; GARRATT, R. ; KLAHOLZ, B.	152
PG7 - Two-photon absorption and multiphoton excited fluorescence of acetoamide-chalcone derivatives: The importance of dimethylamine group on the nonlinear optical and photophysical properties PELOSI, A. ; VALVERDE, J. V. ; COCCA, L. Z. ; GONÇALVES, P. ; SILVEIRA-ALVES JUNIOR, E. ; SILVA, D. ; BONI, L. ; MENDONÇA, C.	153
PG8 - Higher-order QCD in Higgs to gluon-gluon BOITO, D. ; NOGUEIRA, G.	155
PG9 - Effects of electromagnetic radiation on the mitochondria bioenergetics PEREZ, A. S. ; INADA, N. ; MEZZACAPPO, N. ; VOLLET FILHO, J. D. ; CASTILHO, R. F. ; VERCESI, A. E. ; BAGNATO, V. S.	156
PG10 - Search for exotic particles (Q-balls) in ultra-high energetic astroparticles. PAULA, T. ; SOUZA, V. ; ARBELETCHÉ, L. B.	157
PG11 - Structural and biophysical investigations into vitamin B6 synthase assembling BARRA, A. ; NASCIMENTO, A. S.	158
PG12 - Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos BARBOSA, M. G. ; VANZELLA, D. A. T.	160
PG13 - Análise da inclusão de grupos periféricos na resposta óptica não linear em derivados de imidazo[4,5-b]piridina OSPINA, O. M. ; MENDONÇA, C. ; VALVERDE, J. V. ; BONI, L. ; PELOSI, A. ; COCCA, L. Z. ; PIGUEL, S.	161

PG14 - Study of the relationship between two-photon absorption and dipolar properties in imidazo[1,2-a]pyridine derivatives VALVERDE, J. V. ; PELOSI, A. G. ; COCCA, L. Z. ; OSPINA, O. M. ; PIGUEL, S. ; SILVA, D. L. ; BONI, L. ; MENDONÇA, C. R.	163
PG15 - Investigação da discussão acerca da consistência termodinâmica de temperatura negativas INAGAKI, J. H. M. ; BRITO, F.	165
PG16 - Numerical Challenges for Nonlinear Coupled Dipole Model MOREIRA, N. A. ; BACHELARD, R.	166
PG17 - Estudo da complexidade emergente de modelos topológicos com base na entropia de motifs de redes DOMINGUES, G. S. ; COSTA, L. F.	167
PG18 - Inkjet-printed complementary inverters based on Organic Electrochemical Transistors LUGINIESKI, M. ; FARIA, G.	168
PG19 - Synthesis of optimal unitary transformations for the study of quantum complexity MORAZOTTI, N. A. C. ; NAPOLITANO, R. J.	169
PG20 - Synthesis of Niobium Phosphate Glasses and Structural Characterization by Solid State NMR ENSUNCHO, L. ; BRADTMULLER, H. ; ECKERT, H.	170
PG21 - Probing the singularities of the Landau-gauge gluon and ghost propagators with rational approximants BOITO, D. ; CUCCHIERI, A. ; LONDON, C. Y. M. ; MENDES, T.	171
PG22 - Microambientes 3D e seu uso no cultivo de bactérias probióticas OTUKA, A. J. G. ; OLIVEIRA, A. B. ; FONTANA, C. R. ; MENDONÇA, C. R. ; MORAES, J. Q. R.	172
PG23 - Combinação de antibiótico com inativação fotodinâmica para o tratamento de infecções bacterianas SOARES, J. M. ; GUIMARAES, F. E. G. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C.	174
PG24 - BEC with dipolar interaction in a shell BERETA, S. ; SANTARELLI, M. A. C.	175
PG25 - Degradação de polissacarídeos de biofilmes de <i>S. mutans</i> por α-1,3 (PmGH87) e α-1,6 (CoGH66) glucanases CORTEZ, A. ; POLIKARPOV, I. ; QUEIROZ, M. X. ; SOUSA, A. N. G. D. D. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; PRATAVIEIRA, S. ; RICOMINI FILHO, A. P.	176

PG26 - Amplificative–dissipative tunneling: the Problem of genetic mutation ARAUJO, H. S. ; MOUSSA, M. H. Y.....	178
PG27 - Classificação de minérios de ferro QUEIROZ, A. E. ; ANDRADE, M. B.....	179
PG28 - Propagadores de quark no calibre de Coulomb a partir da QCD na rede LEAL JUNIOR, J. M. ; SKULLERUD, J. ; SILVA, P. ; KALUSCHE, G.....	180
PG29 - Bose-Einstein condensates and the thin-shell limit in anisotropic bubble traps. BIRAL, E. ; SANTOS, F. E. A.....	181
PG30 - Rapidly rotating condensates in a Bubble Trap TOMISHIYO, G. ; SANTARELLI, M. C.	183
PG31 - Algoritmo quântico para solução de equações diferenciais lineares MACIEL, M. D. ; BRITO, F. B.....	184
PG32 - A dependência temporal da descoerência de um qubit por ruído de fase: cálculos analíticos das soluções exatas e da equação mestra MOTTA, O.	186
PG33 - Inativação Fotodinâmica do <i>Rhizopus oryzae</i> – Estudo in vitro MARQUES, M. J. A. M. ; ALVES, F. ; GUIMARAES, F. E. ; KURACHI, C.	187
PG34 - Nonequilibrium thermodynamics of process optimization using optical tweezers MARTINS, T. T. ; MUNIZ, S. R. ; KAMIZAKI, L. P.....	188
PG35 - Insights of Solid State NMR: the Non-Linear Macroscopic Properties of Silica-Aluminophosphate Glasses SANTOS, M. L. ; ECKERT, H. ; IKEDA, H. ; NAKANE, S. ; YAMAZAKI, H.	189
PG36 - Majorana-based transistor DOURADO, R. ; EGUES, J. C.	190
PG37 - Explorando processos quânticos não-Markovianos dentro do formalismo do tensor de processo ZAMBON, G. C.	191
PG38 - Buscas indiretas de matéria-escura com observatórios de raios-gama. MASSINO, E. G. ; SOUZA FILHO, L. V.	192

PG39 - Trabalho como Funcional Dependente da Simetria: uma Abordagem por Integral de Trajetória AFONSO, R. ; PINTO, D. S.	193
PG40 - <i>Cluster epa de Enterococcus faecalis: EpaE</i> DANTAS, L. ; NASCIMENTO, A.	194
PG41 - Desenho inteligente de dispositivos fotônicos fabricados via polimerização por dois fótons PARRA, I. ; MENDONÇA, C.	195
PG42 - Estudos biofísicos e estruturais das septinas de <i>Drosophila melanogaster</i> FERNANDES, A. ; CABREJOS, D. A. L. ; CAVINI, I. A. ; ROSA, H. ; PEREIRA, H. D. ; NASCIMENTO, A. ; GARRATT, R.	197
PG43 - Searching for dark matter in dwarf galaxies with 14 years of observations of the Fermi Large Area Telescope SILVA, L. ; VIANA, A.	199
PG44 - Converting images into complex networks by deterministic walks. MERENDA, J. V. ; BRUNO, O. M.	200
PG45 - Estudos termodinâmicos de gases quânticos (Condensados de Bose-Einstein), à nível local e global MARTINS, E.	201
PG46 - Plasmon-enhanced light-matter interaction in MoS2 monolayer by Gold Nanostructures LEMES, M. F. S. ; MAREGA JUNIOR, E. ; MAREGA, G. M. ; KIS, A.	202
PG47 - Avaliação dos mecanismos de fotobioestimulação na bioenergética mitocondrial MEZZACAPPO, N. F. ; INADA, N. ; PEREZ, A. S. ; CASTILHO, R. F. ; SIQUEIRA-SANTOS, E. S. ; VERCESI, A. E. ; BAGNATO, V. S.	203
PG48 - Bases estruturais do perfil de resistência dos compostos nirmatrelvir e ensitrelvir contra polimorfismos em circulação da enzima Main Protease (Mpro) do vírus SARS-CoV-2 NOSKE, G. D. ; GODOY, A. ; OLIVA, G. ; DOLCI, I. ; SILVA, E. S. ; GODOY, M. O. ; FERNANDES, R. ; GUIDO, R.	204
PG49 - Utilização da terapia fototérmica e agentes clareadores ópticos para tratamento do melanoma cutâneo MARTINELLI, L. P. ; JASINEVICIUS, G. O. ; MORIYAMA, L. T. ; BUZZA, H. H. ; CHEN, J. ; ZHENG, G. ; KURACHI, C.	206

PG50 - Cavidade óptica para experimentos com átomos de Rydberg FERNANDEZ, D. R. ; TORRES, M. L. ; GOMES, N. D. ; KONDO, J. D. M. ; CARDOSO, M. ; MARCASSA, L. G.....	208
PG51 - Optical dosimetry and photokinetic simulations for the analysis of indocyanine green during photodynamic therapy in the pig thoracic cage with 808 nm TOVAR, J. S. D. ; KASSAB, G. ; BAGNATO, V. S. ; KURACHI, C.	209
PG52 - Estudos estruturais da proteína Tiamina Monofosfato Sintase de <i>Enterococcus faecalis</i> (EfThiE) GUTIERREZ, R. F. ; NASCIMENTO, A. S.	210
PG53 - Electromagnetically induced transparency in hot Rydberg atoms with polarization spectroscopy and Laguerre-Gaussian modes GOMES, N. D. ; MAGNANI, B. F. ; KONDO, J. D. M. ; MARCASSA, L. G.....	212
PG54 - Search for dark matter in very-high-energy gamma-rays with H.E.S.S. and upcoming ground-based arrays REIS, I. ; VIANA, A. E. M.....	213
PG55 - Indirect search for dark matter in Dwarf Galaxies with the Southern Wide field-of-view Gamma-ray Observatory ANDRADE, M. J. D. ; VIANA, A. E. M.....	214
PG56 - Avaliação do perfil parasitológico de uma série de derivados indólicos como agentes antimaláricos MOURA, I. ; ZANINI, C. ; BARBOSA, C. S. ; SOUZA, G. ; AGUIAR, A. C. C. ; SCIPIONE, L. ; PANDOLFI, F. ; GUIDO, R.	215
PG57 - Estudos estruturais da enzima RmlA de <i>Streptococcus pneumoniae</i> MORENO, L. ; NASCIMENTO, A.....	217
PG58 - Funcionalização de superfícies nanoestruturadas para desenvolvimento de plataformas para sensores ópticos MATTOS, V. S. ; GUIMARAES, F. E. ; CASTRO NETO, J. C.	218
PG59 - Spectroscopy study of tellurite-germane-tungsten-zinc glasses codoped with Er^{3+} and Pr^{3+} RICALDI, J. Y. A. C. ; CALDERÓN, G. L. ; HUAMAN, J. L. C. ; RIVERA, V. A. G. ; MESSADDEQ, Y. ; MAREGA JUNIOR, E.....	220
PG60 - Caracterização comparativa de esqueletos de corais do Holoceno recente e moderno FERREIRA, P. ; ALMEIDA, J. M. P. ; PESSENDA, L. ; HERNANDES, A. C.	221

PG61 - Excitation of Bose-Einstein condensates with temporal resolution in separate zones MACHADO, L. A. ; MADEIRA, L. ; SANTARELLI, M. C. ; BAGNATO, V. S. ; MIDDELETON-SPENCER, H. ; GALANTUCCI, L. ; BARENGHI, C. F.....	223
PG62 - Effective Hamiltonian Lasers and Strengthening the atom-field coupling via pseudo-Hermitian Hamiltonians OLIVEIRA NETO, F. ; MOUSSA, M.....	225
PG63 - Espectroscopia ultrarrápida: técnica de excitação e prova degenerada, não degenerada, e resolvida em polarização GARCIA, R. ; BONI, L.	226
PG64 - Influence of cytochrome P450 3A4 and membrane lipid composition on doxorubicin activity SANTOS, K. F. ; MATERON, E. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	228
PG65 - Caracterização de previsões coletivas: sabedoria das massas SIQUEIRA NETO, N. S. ; FONTANARI, J. F.	230
PG66 - Núcleos Ativos de Galáxias e Galáxias Starbursts como fonte dos sinais de anisotropia dos UHECR OLIVEIRA, C. ; SOUZA FILHO, L. V.	231
PG67 - Coherence map reconstruction using NV centers in diamonds ANDRADE, L. N. S. ; MUNIZ, S. R.....	232
PG68 - Discovery of brissonol as a lead candidate for malaria BARBOSA, C. S. ; AHMAD, A. ; MALUF, S. ; MOURA, I. R. ; SOUZA, G. E. ; BURTOLOSO, A. C. ; AGUIAR, A. C. A. ; GUIDO, R. V. C.	233
PG69 - Simulações hemodinâmicas por meio de imagens de ressonância magnética em artérias SOLCIA, G. ; PAIVA, F. F. ; PASCHOAL, A. M. ; LEONI, R. F.....	234
PG70 - Fabricação de microressonadores poliméricos dopados com nanodiamantes via fotopolimerização por absorção de dois fótons COUTO, F. ; OTUKA, A. ; MENDONÇA, C.....	236
PG71 - Desenvolvimento de sistema óptico para iluminação de córnea utilizado em tratamento de ceratites LAISSENER, B. S.	238
PG72 - Searching for heavy dark matter with gamma-rays JUSTINO, L. R. ; VIANA, A. ; SIQUEIRA, C.	239

PG73 - Construção de sistema de translação óptica de átomos frios com uso de sistema de lentes de zoom opticamente compensadas.	
MARTINEZ, V. J. ; HENN, E. A. L.	240
PG74 - Simulation of plasmonic nanostructures for polarization control/selection of the emission of Er³⁺ in tellurite glasses	
CALDERÓN, G. L. ; MAREGA JUNIOR, E.	242
PG75 - Investigações para promoção do controle da pneumonia por ação fotodinâmica	
LIMA, I. A. ; BAGNATO, V. S.	243
PG76 - Structural and functional characterization of three key enzymes in the biosynthesis of vitamin C from <i>Myrciaria dubia</i>	
SANTILLAN, J. A. V. ; PEREIRA, H. D. M. ; CABREJOS, D. A. L. ; GARRATT, R. ; GÓMEZ, J. C. C.	245
PG77 - Engenharia de septinas: quimeras envolvendo a região do coiled-coil	
MAMANI, E. C. ; ARAÚJO, A. P. U.	247
PG78 - Oscilações tipo Josephson em condensados de Bose-Einstein espinoriais: uma possível detecção de simetria	
DONATO, M. H. F. ; MUNIZ, S. R.	248
PG79 - Avaliação da atividade antiplasmodial de frações fúngicas endofíticas	
MENDES, G. R. ; BARBOSA, C. S. ; MOREIRA, N. M. ; OLIVEIRA, C. R. ; AMORIM, M. R. ; BERLINCK, R. G. S. ; GUIDO, R. V. C.	249
PG80 - Um estudo em cordas cósmicas com um grau extra de liberdade	
GREGORIO, G. M. ; HARTMANN, B.	250
PG81 - Study of the mechanism of viral entry inhibitors and SARS-CoV-2 pseudovirus neutralization assay in the BSL2 laboratory	
PINTO, F.; SADRAEIAN, M.; MIRANDA, M.; GUIMARÃES, F. E.; DIAZ, R. S. ; CABRAL-MIRANDA, G.	251
PG82 - Classifying phenotypes using information theory	
MARTINELLI, T. ; LÁZARO, C. G. ; RODRIGUES, F. A. ; MORENO, Y.	252
PG83 - Development of a computational model for designing the evolution of plasma scenarios in the TCABR tokamak	
ASNIS, Y. ; CANAL, G.	253
PG84 - Credulidade completa e erosão da confiança em um modelo de informação enganosa	
TÓRTURA, H. A. ; FONTANARI, J. F.	254

PG85 - Estudo teórico do fenômeno de cavitação acústica no tecido biológico para otimização da Terapia Sonodinâmica (SDT) ANTUNES, C. A. ; PRATAVIEIRA, S.	256
PG86 - Otimização de geradores termoelétricos via geometria das patas termoelétricas e utilização de novos materiais BOCCHI, J. H. C. ; FARIA, G. C. ; PEREIRA, G. G. D.	258
PG87 - Estudo de chuveiros atmosféricos e reconstrução de perfis longitudinais para o Cherenkov Telescope Array GILER, A. G. D. ; SOUZA, V. ; VECCHI, M.	260
PG88 - Desenvolvimento de um sistema inteligente aplicado à Agricultura de Precisão para classificação de plantas de soja e plantas daninhas em tempo real utilizando imagens multiespectrais ODA, Y. S. ; CASTRO NETO, J. C.	261
PG89 - Caracterização experimental e propriedades de condensados de Bose-Einstein fora do equilíbrio ARMIJOS, M. A. M. ; BAGNATO, V. S. ; FRITSCH, A. R. ; OROZCO, A. D. G. ; SAB, S. ; TELLES, G. D.	263
PG90 - Calibração e metodologia de medidas aplicadas ao espectrômetro de Ressonância Magnética digital (DMRS) do CIERMag MARCOLAN, J. ; TANNÚS, A.	264
PG91 - Controvérsias e Informações PENA, A. B. ; SILVA, C. C.	266
PG92 - Descoberta de novos inibidores para Covid-19: estudos integrados de modelagem molecular e ensaios experimentais NOGUEIRA, V. ; GODOY, M. O. ; FREIRE, M. ; SOUZA, G. ; FASSIO, A. V. ; GUIDO, R. V. C. .	267
PG93 - Coherent light-matter interaction in dense atomic clouds FERNANDEZ, M. F. ; DIAS, P. G. S. ; MAGNANI, P. H. N. ; AMARAL, M. ; COURTEILLE, P. W. ; TEIXEIRA, R. C.	269
PG94 - Necessidade de apoio à educação especial no ensino superior com ênfase na Universidade de São Paulo MASSON, R.	270
PG95 - Femtosecond laser-induced hyper-Raleigh scattering: an frequency-resolved study of the first-order molecular hyperpolarizability of organic molecules SANTOS, C. H. D. ; COCCA, L. H. Z. ; PELOSI, A. G. ; VIVAS, M. G. ; SIQUEIRA, J. P. ; MENDONÇA, C. R. ; BONI, L.	272

PG96 - Lactonas e híbridos de quinazolina e chalcona como perturbadores da dinâmica do citoesqueleto de microtúbulo SOUZA, M. S. ; SILVA, T. S. ; MASS, E. B. ; COELHO, F. ; RUSSOWSKY, D.	274
PG97 - Descoberta de inibidores para a protease principal (nsp5) de SARS- CoV-2: Estudos estruturais e planejamento de candidatos a fármacos antivirais GODOY, M. O. ; SANTOS, J. ; NOSKE, G. D. ; GODOY, A. ; OLIVA, G. ; CORREA, A. ; GUIDO, R. V.	276
PG98 - Aprimorando a descrição dos decaimentos hadrônicos do lépton tau OLIANI, F. ; BOITO, D. R.	278
PG99 - Reconstrução da profundidade de máximo de chuviros atmosféricos extensos utilizando uma rede neural perceptron multicamadas VAZ, B. A.	279
PG100 - Desenvolvimento de um sistema com arquitetura em nuvem para a detecção de ceratocone subclínico por meio de <i>deep learning</i>, utilizando mapas de topografia da córnea OLIVEIRA, L. O. ; SIQUEIRA, W. C. A. ; CASTRO NETO, J. C. ; TAGUCHI, F. M. C.	280
PG101 - On the nature of the black hole information problem BERGAMASCHI, T. ; BERNARDES, E. S.	281
PG102 - Estudo da markovianidade em sistemas quânticos que evoluem com mapas não-lineares VIDOR, C. R. ; BRITO, F. B.	282
PG103 - Design e modelamento de microestruturas poliméricas PEREIRA, V. A. M. C. ; MENDONÇA, C. R.	284
PG104 - Sondando matéria escura no Sol através de raios gama FAGIANI, J. V. ; SOUZA FILHO, L. V. ; SIQUEIRA, C. M.	286
PG105 - Kondo screening across a metal-insulator transition ALMEIDA, I. C. ; ANDRADE, E. C.	287
PG106 - Development and validation of a novel analytical method for quantification of a new chromene-based molecule using RP-HPLC MORENO, N. S. ; ZUCOLOTTI, V. ; FERREIRA, N. N. ; SUZUKI, I. L. ; BALTAZAR, M. F. M. ; COSTA, M. S. F.	288
PG107 - Dinâmica de um condensado de Bose-Einstein turbulento BARROS, L. ; SANTARELLI, M. C. ; BAGNATO, V. S.	289

PG108 - O papel de simetrias e grupos em modelos de machine learning quântico HABERMANN, G. ; PINTO, D. S.	291
PG109 - Analysis of narrow-line magneto-optical traps through stochastic simulation SANTOS, B. N. ; HENN, E. A. L.	292
PG110 - Produção de manooligossacarídeos a partir de pré-tratamentos verdes em resíduos agroindustriais e aplicação enzimática CAPETTI, C. ; POLIKARPOV, I. ; SOUSA, A. N. G. D. D. ; PELLEGRINI, V. O. A.	293
PG111 - Critério para adiabaticidade via geometrias clássicas MAGNO, G. F. ; FERREIRA, C. H. G. ; SOARES-PINTO, D.	295
PG112 - Engenharia de cristais aplicada ao setor de anti-hipertensivos farmacêuticos - Hidralazina a forma solida pura FIRMINO, P. P. ; ELLENA, J. ; SANTIAGO, P.	296
PG113 - Plasmonic substrates composed of gold nano-islands for detection of SARS-CV-2 virus. OITICICA, P. R. A. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	298
PG114 - Non-thermal gamma-ray emission in the Galactic Center region SOUSA, D. B. ; VIANA, A. E. M.	299
PG115 - Efeitos da melanina e da hemoglobina na cor da pele humana: um estudo teórico-computacional LIMA, V. P. G. ; MORIYAMA, L. T.	300
PG116 - NMR diffusion in porous media approached by a fractional Langevin model: applications to petrophysics PEREIRA-ALVES, F. ; OLIVEIRA, É. L. ; BONAGAMBA, T. J.	301
PG117 - Computação de reservatório: polímeros conjugados como viabilizador de um reservatório físico SOUZA, R. F. S. ; TORRES, B. B. M. ; FARIA, G. C.	303
PG118 - Avaliação dos efeitos da aplicação de ultrassom de baixa intensidade pré-radioterapia para tratamento do câncer: modelo animal CUMPALLI, A. A. ; AYALA, E. T. P. ; BAGNATO, V. S. ; PRATAVIEIRA, S.	305
PG119 - Microscopia holográfica sem lentes com algoritmos de reconstrução de fase baseados nos métodos multiespectral e multialturas D'ALMEIDA, C. P. ; OLIVEIRA, N. P. ; FEITOSA, P. ; KURAMOTO, C. ; CARVALHO, F. ; COSTA, G. F. ; PRATAVIEIRA, S.	307

PG120 - Estudo de microfabricação com pulso de femtossegundo em SiC BUOZZI, M. T. ; HUAMAN, J. L. C. ; MENDONÇA, C. R.	309
PG121 - Elucidação do alinhamento interfacial de bandas e aplicação fotoeletroquímica da heterojunção CuWO₄/BiVO₄ RABELO, L. G. ; ROSA, W. S. ; GONÇALVES, R. V.	310
PG122 - Algoritmos quânticos variacionais FERREIRA, P. C. A. ; SOARES-PINTO, D. O.	312
PG123 - Sistemas estáticos, estacionários e dependentes do tempo no Anti-de-Sitter e sua interpretação holográfica RAMPONI, T. C. ; HARTMANN, B.	314
PG124 - Estudos estruturais e bioquímicos de 10 enzimas com possível atividade de PET hidrolase oriundas de metagenoma antártico FURTADO, A. A. ; SANTILLAN, J. A. V. ; PEREIRA, H. D. M. ; CABREJOS, D. A. L. ; RAMIREZ-SARMIENTO, C. A. ; GARRATT, R. C.	315
PG125 - Algoritmos quânticos variacionais e o aprendizado de máquina quântico geométrico CORRER, G. I. ; SOARES-PINTO, D. O.	316
PG126 - Desenvolvimento e validação de biossensores portáteis de baixo custo de anticorpo para diagnóstico de doenças: dengue CAMARGO, M. A. ; GONÇALVES, D.	318
PG127 - Análises biofísicas e possíveis aplicações de partículas semelhantes a vírus de circovírus suíno tipo 3 (PCV3) ROCHA, T. S. ; SALA, F. A. ; GARRATT, R. C. ; THIEMANN, O. H.	320
PG128 - Estudo sobre os padrões espaço-temporais de autômatos celulares em redes complexas JOAQUIM, D. T. ; BRUNO, O. M.	321
PG129 - Descontaminação de rim ex-vivo para transplante com radiação ultravioleta-C e ultrassom GOENAGA, L. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.	323
PG130 - Simetrias escondidas das Teorias de Gauge MALAVAZZI, H. ; FERREIRA, L. A. ; LUCHINI, G.	325
PG131 - Sistema de lasers multimodo para bombeamento ótico de um feixe supersônico de Rb_2 TORRES, M. L. ; FERNÁNDEZ, D. R. ; CARDOSO, M. R. ; MARCASSA, L. G.	326

PG132 - Análise multiparamétrica do problema de fases em cristalografia de proteínas por aprendizado de máquina. Caso de estudo: lisozima da clara do ovo de galinha JUCOVSKI, A. ; AMBROSIO, A. L. B.	327
PG133 - Fornecimento de gemcitabina e paclitaxel usando nanopartículas derivadas de membrana celular para quimioterapia e imunoterapia contra o câncer. QUITIBA, J. ; ZUCOLOTTI, V.	329
PG134 - Efeitos de strain na fase zincblend em nanofios politípicos SIQUEIRA, A. H.; SIPAHI, G. M.	330
PG135 - Desenvolvimento de imunossensor impedimétrico eletroquímico para diagnóstico da tuberculose RIBEIRO, L. V. ; ZUCOLOTTI, V.; BERNARDI, J. C.	331
PG136 - Turbulent Bose-Einstein condensates as an out-of-equilibrium quantum systems OROZCO, A. D. G. ; BAGNATO, V. S. ; MADEIRA, L. ; FRITSCH, A. R. ; ARMIJOS, M. A. M. .	332
PG137 - Estudos estruturais da enzima RmlA de streptococcus pneumoniae MORENO, L. ; NASCIMENTO, A.	333
PG138 - Quantum gases research out of equilibrium-quench SALCEDO, E. G. I. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; CASTILHO, P. C. M. ; CHACCA, C. W. T. ; FARIAS, K. M. ; FERNANDES, J. C. ; GASPAR, P. M. ; BAGNATO, V. S.	334
PG139 - Performance the “Quench” process into the Hamiltonian of a confined Bose-Einstein condensate CHACCA, C. W. T. ; SALCEDO, E. G. I. ; FARIAS, K. M. ; CASTILHO, P. C. M. ; BAGNATO, V. S. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; GASPAR, P. M.	335
PG140 - Gigantes Microscópicos: o uso da Cryo-EM para elucidação de estruturas de hemocianinas ELLENA, M. ; MUÑOZ, S. M. M. ; FERNÁNDEZ, V. C. ; LEGUIA, V. C. G. ; BECKER, M. I. ; AMBROSIO, A. L. B.	336
PG141 - Charged and radially excited boson stars CONSOLE, F. ; HARTMANN, B. ; BRIHAYE, Y.	337
PG142 - Caracterização bioquímica e estrutural de Shs1: uma septina única de Saccharomyces cerevisiae SALADINO, G. C. R. ; CAVINI, I. A. ; ARAUJO, A. P.	338
PG143 - Mapeamento do campo elétrico em transistores poliméricos por espectroscopia SFG SOUSA, M. S. ; GUNTHER, F. S. ; MIRANDA, P. B.	340

PG144 - Cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica, uma abordagem via NRG DINIZ, G. ; OLIVEIRA, L. N.	341
PG145 - Reconstrução de modelos radiativos da fonte central de raios gama do centro galáctico MOMESSO, D. C.; VIANA, A.	343
PG146 - Celulas solares orgânicas: estudo de estabilidade e degradação sob uso contínuo FLOREZ, Y. A. ; FARIA, G. C.....	344
PG147 - Nanopartículas biomiméticas revestidas com membranas celulares como estratégia inovadora na terapia do câncer de pulmão BISTAFFA, M. J. ; STERMAN, R. ; CARDOSO, V. M. O. ; ZUCOLOTTO, V.....	345
PG148 - Near infrared optical thermometry in fluorophosphate glasses doped with Nd³⁺ and Nd³⁺/Yb³⁺ FARIA, W. ; CAMARGO, A. ; GONÇALVES, T.	347
PG149 - Formulação para cálculo de campo magnético e homogeneidade em ímãs de RMN que apresentam configuração geométrica “H” circular tri-dimensional. BERNARDES, D. F. ; AZEVEDO, E. R.	348
PG150 - Spontaneous scalarization in the presence of magnetic fields CAPOBIANCO, R. ; HARTMANN, B.....	350
PG151 - Validação de um método analítico inovador para quantificação simultânea do erlotinibe e cisplatina a partir de nanovesículas biomiméticas STERMAN, R. ; BISTAFFA, M. J. ; CARDOSO, V. M. O. ; ZUCOLOTTO, V.....	351
PG152 - Produção de H₂ verde a partir da dissociação fotocatalítica da água utilizando a heterojunção p – n SrTiO₃/NiO@Ni(OH)₂ CENTURION, H. A. ; GONÇALVES, R. V. ; RABELO, L. G.....	353
PG153 - Caracterização da sensibilidade visual de peixes elétricos de campo fraco: instrumentação eletrofisiológica dedicada não-invasiva aplicada à neuroetologia BELLINI, B. S. ; PINTO, R. D. ; ALMEIDA, L. B.	355
PG154 - Purificação quântica através de um estado quádruplo para incluir ruído ambiental e aparato de medida na investigação do conceito de complexidade quântica AUDI, G. ; NAPOLITANO, R.....	357

PG155 - Caracterização óptica e bioquímica da melanina – estudo comparando a melanina sintética e biológica SOUZA, G. ; GUIMARAES, F. E. ; KURACHI, C.	358
PG156 - Extração de informações biológicas de redes a partir de medidas topológicas SANTOS, J. P. C. ; BRUNO, O. M.	359
PG157 - Simulação de interação através do mapa de Dyson SILVA, L. ; MOUSSA, M.	360
PG158 - Nanopartículas de fuligem isoladas agindo como uma fonte eficiente de oxigênio singleto: efeitos da agregação molecular e sua estrutura energética VICENTE, M. L. F. ; PRADO, A. G. A. ; SANTOS, N. V. ; VERAS, M. M. ; PRATAVIEIRA, S. ; SALDIVA, P. ; GUIMARAES, F. E. G.	361
PG159 - Dinâmica do quench em condensados de Bose - Einstein em átomos de sódio. ANDRADE, M. ; HENN, E. A. L.	363
PG160 - Predição de interações fármaco-alvo com Biclustering Random Forests ILIDIO, P. ; ALVES, A. H. R. ; THIEMANN, O. ; CERRI, R.	364
PG161 - Investigação da resposta imunológica <i>in vitro</i> em câncer de pele melanoma após combinação de Radioterapia e Terapia Fotodinâmica LOPES, R. G. ; FARIA, C. ; MEDEIROS, A. I. ; BAGNATO, V. S. ; INADA, N.	366
PG162 - Estudo de novas técnicas experimentais para discriminação de diferentes efeitos ópticos não lineares MOYSES, R. M. ; MISOGUTI, L.	368
PG163 - Experimentos <i>in vitro</i> utilizando <i>phantom</i> para investigação do comportamento do ultrassom na terapia sonodinâmica GONCALVES, I. ; ALVES, F. ; PRATAVIEIRA, S. ; BAGNATO, V. S.	370
PG164 - Estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido a quebra da invariância de Lorentz CASTILHO, R. R. ; HUERTA, H. M.	372
PG165 - Detecção de plantas espontâneas utilizando aprendizado profundo em imagens multiespectrais MARINHO, F. A. ; CASTRO NETO, J. C.	374
PG166 - Reposicionamento farmacêutico por meio do desenvolvimento de novas formas sólidas para o tratamento de Covid-19 NUNES, P. ; SANTIAGO, P. H. O. ; ELLENA, J. A.	375

PG167 - Prospecção da interface de interação no processo de polimerização da enzima glutaminase C.	
ABREU, F. M. O. ; AMBROSIO, A. ; TANIMOTO, C. ; DIAS, S. M. G.	376
PG168 - Algoritmos quânticos variacionais	
DRINKO, A. ; PINTO, D. O. S.	378
PG169 - Seleção de bactérias isoladas de um reservatório brasileiro para a produção de biossurfactante: análises da tensão superficial, tensão interfacial e quantificação de proteínas totais do biossurfactante semipurificado	
FERREIRA, J. F. ; BOSSOLAN, N. R. S.	379
PG170 - Estudo da combinação de Terapia por Fotobiomodulação e Radioterapia na vascularização	
COSTA, C. ; FARIA, C. ; PATINO, C. P. B. ; SOUZA, G. ; BAGNATO, V. S.	381
PG171 - Unveiling the origin of UHECR: the role of local sources	
DOURADO, L. A. ; LANG, R. G. ; SOUZA, V.	383
PG172 - Caracterização bioquímica de uma celobiose desidrogenase de <i>Thermothelomyces thermophilus</i> e sua aplicação como agente antimicrobiano	
SAMANIEGO, L. V. B. ; SOUSA, A. N. G. D. D. ; POLIKARPOV, I.	384
PG173 - Redes de similaridade físico-química	
REIS, R. ; COSTA, L. F.	386
PG174 - Avaliação da atividade oxigenase e peroxigenase de duas LPMOs de <i>Thermothelomyces thermophilus</i> na presença de diferentes agentes redutores	
VACILOTTO, M. M. ; POLIKARPOV, I.	388
PG175 - Studying the interaction of chitosans with different degrees of acetylation with lipid monolayers at physiological pH	
JOHELAVICIUS, K. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	390
PG176 - Estudo dos dígitos menos significativos do mapa logístico	
ALVARENGA, J. P. V. ; BRUNO, O. M.	392
PG177 - Análise multi-resolução inteligente: combinando a transformada wavelet com estratégias de deep learning para redução de ruídos em sinais e imagens de ressonância magnética	
QUEIROZ, G. E. T. ; PAIVA, F. F. ; GUIDO, R. C.	393
PG178 - Septinas de <i>Magnaporthe oryzae</i> : uma abordagem estrutural	
GARRATT, R. ; ARAUJO, A. P. U. ; PINTO, A. P. A. ; FERNANDEZ, L. A. V.	395

PG179 - Estudo da geração de oxigênio singlete e radical hidroxila da Protoporfirina IX e azul de metileno durante a ação fotodinâmica, sonodinâmica e sonofotodinâmica AYALA, E. T. P. ; SOUZA, M. O. ; ALVES, F. ; PRATAVIEIRA, S.....	397
PG180 - Automação de um FrontEnd de RMN para controle de periféricos de baixa velocidade MONTES, R. S. ; TANNUS, A.	398
PG181 - Diagnóstico precoce e não invasivo de tumor usando nanossensores de atividade proteolítica SILVA, E. ; ZUCOLOTTI, V.	399
PG182 - Comportamento crítico e informação quântica em um modelo XY não hermitiano RAMOS, L. ; ALCARAZ, F.	400
PG183 - Estratégias de inativação fotodinâmica no controle do biofilme de <i>Pseudomonas aeruginosa</i> NAKADA, P. J. T. ; ALVES, F. ; POLIKARPOV, I. ; KURACHI, C.	401
PG184 - Uso do vírus psudotipado SARS-CoV-2 para estudos da ação de derivados de Bothropstoxin-I como inibidor de entrada viral CAMARGO, G. M. ; MIRANDA, M. ; PINTO, F. ; GUIMARAES, F. E.....	403
PG185 - Estudo de eficiência de algoritmos para fixação de gauge de Landau SU(2) em temperatura finita e SU(3) em temperatura zero CERQUEIRA, M. C. ; LEAL JUNIOR, J. M. ; MENDES, T.	405
PG186 - Estudo Estrutural da enzima ThiL em patógenos Gram- negativos FARRO, E. G. S. ; NASCIMENTO, A. S.	406
PG187 - Síntese e resultados pré-eliminatórios das propriedades estruturais, morfológicas e fotocatalíticas em efeito do PH do fotocatalisador VIBO4 HERRERA, J. B. V. ; GONÇALVES, R. V. ; ROSA, W. S.....	408
PG188 - Quantum Machine Learning applications on NV centers DOMINGUES, A. V. ; MUNIZ, S. R.	410
PG189 - Preparation of mesoscopic atomic superpositions via superradiance ROCHA, L. ; MOUSSA, M. H. Y.	411
PG190 - Interações átomo-cavidade em cavidade anelar com estrôncio PESSOA JUNIOR, C. ; COURTEILLE, P. W. ; RIVERO, D. ; FRANÇA, G. ; TEIXEIRA, R. C.	412

PG191 - Remoções de arestas condicionadas por maleabilidade e seus efeitos na ativação de nós em redes complexas.	
FURUTA, R. H. M. ; COSTA, L. F.	413
PG192 - Aprendizado de características texturais complexas com redes neurais randomizadas em grafos	
ZIELINSKI, K. M. C. ; BRUNO, O. M. ; RIBAS, L. C.	414
PG193 - O papel do ligante na estabilidade de nanopartículas Bi₂S₃	
GALAIN, I.; MORENO, N. S.; ZUCOLOTTI, V.; BARTHABURU, M. P.; AGUIAR, I.	416
PG194 - Integração do framework PyMR com o ambiente integrado de desenvolvimento Spyder e sua adaptação à projetos de Ressonância Magnética	
CORREIA, D. S. ; TANNUS, A.	418
PG195 - Método de fitting de estruturas de bandas a partir de estratégias envolvendo propriedades de simetria	
WANDERLEY, A. B. ; SIPAHI, G. M.	420
PG196 - Topological and transport properties of the Su-Schrieffer-Heeger model	
ARAUJO, Í. M. ; PENTEADO, P. H. ; EGUES, J. C.	422
PG197 - Efeitos toxicológicos das nanopartículas de óxido de Cério (CeO₂) e óxido de Zinco (ZnO) na microalga marinha Navicula sp.	
TUESTA, M. M. ; ZUCOLOTTI, V.	423
PG198 - Avaliação de técnicas ópticas para descontaminação de órgãos sólidos para transplante em modelos in vitro e ex vivo	
GAMEZ, Y. M. ; KURACHI, C. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N.	425
PG199 - Plasmídeos e ambientes genéticos envolvidos na transferência do gene blaKPC em bactérias gram-negativas de origem clínica	
BORALLI, C. ; PAGANINI, J. ; MENESES, R. ; MATA, C. ; SCHÜRCH, A. ; PAGANELLI, F. ; CAMARGO, I. L. B. C.	427
PG200 - Magnetic order and RKKY interactions in metallic quasicrystals	
ARAUJO, R. N. ; ANDRADE, E.	429
PG201 - Caracterização de minerais brasileiros por difração de raios X, espectroscopia Raman e microsonda eletrônica	
LOPES, G. ; ANDRADE, M. ; ATENCIO, D.	430
PG202 - Evolução dos observáveis de um gás quântico aprisionado	
MARINO, Á. V. M. ; MADEIRA, L. ; BAGNATO, V. S.	432

**PG203 - Análise Evolutiva e Estrutural de Genes Associados ao Diabetes Mellitus
Tipo 2**

MOTA, D. ; SETUBAL, J. ; JORGE, A. 433

PG204 - Platinum micromachining using femtosecond laser pulses

ROCHA, L. E. R. ; MENDONÇA, C. ; TASSO, K..... 435

**PG205 - Nanomedicine applied to acute myeloid leukemia treatment via Macrophages
CD44 receptors**

ANTONIO, L. ; RIBOVSKI, L. ; ZUCOLOTTI, V..... 436

IC1

Desenvolvimento de Cavity Laser Ti:Safira Femtossegundos

PINTO, Vinícius Pereira; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de; YASUOKA, Fatima Maria Mitsue; NOGUEIRA, Giovana Trevisan

viniciuspinto@usp.br

O laser Ti:Safira Femtossegundos é um laser de estado sólido pulsado desenvolvido em 1986 por Moulton (1), caracterizado por ser constituído de um cristal de safira dopada com íons de titânio, $\text{Ti}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$, que possui uma estrutura de quatro níveis. A banda de emissão do cristal é da ordem de 200nm, o que permite a geração de pulsos de ordem de 10fs em 800nm. O cristal possibilita o método *Kerr Lens Mode-locking* (2), uma vez que apresenta propriedades ópticas não lineares de terceira ordem que produz o efeito de auto-focalização em altas intensidades. A operacionalidade do laser de pulsos ultracurtos exige a completa estabilidade da cavidade óptica, através do alinhamento preciso de forma a provocar o aumento do número de modos acoplados igualmente espaçados de acordo com a taxa de repetição, atingindo o regime de modos travados. É necessário a revisão óptica e otimização da cavidade com o objetivo de definir as condições de estabilidade para geração de pulsos ultracurtos. A cavidade, que é em formato em anel do tipo *bow tie*, utiliza um par de espelhos de varredura (*chirped mirrors*) para compensação da dispersão de atraso de grupo (*GDD*) e pode ser utilizada para o desenvolvimento de sistemas de marcação colorida, pentes de frequência ópticas de terahertz e relógios atômicos ópticos.(3)

Palavras-chave: Laser femtossegundos. Cavidade em anel. Ti:safira.

Agência de fomento: FAPESP (2021/08202-8)

Referências:

- 1 MOULTON, P. F. Spectroscopic and laser characteristics of $\text{Ti}:\text{Al}_2\text{O}_3$. **Journal of Optical Society of America B**, v. 3, n. 1, p. 125–133, Jan. 1986.
- 2 ZILIO, S. C. **Óptica moderna** - fundamentos e aplicações. São Carlos: Instituto de Física de São Carlos, 2009.
- 3 NOGUEIRA, G. T.; CRUZ, F. C. Efficient 1 GHz Ti: sapphire laser with improved broadband continuum in the infrared. **Optics Letters**, v. 31, n. 13, p. 2069–2071, July 2006.

IC2

Classificação de autômatos celulares através de redes neurais

FABRIS, Vitor

fabrisvitor@estudante.ufscar.br

Aplicamos Redes Neurais Convolucionais (CNNs) em diagramas espaço-tempo (*space-time diagrams*, STDs) de autômatos celulares elementares (*elementary cellular automata*, ECAs) para desenvolver uma classificação automática. Levando em consideração a classificação proposta por Stephen Wolfram (1), que sugere quatro classes de comportamento para ECAs com base em uma análise visual da evolução de seus diagramas, propomos uma extração de características visuais com duas CNNs seguida da aplicação de técnicas de redução de dimensionalidade e, finalizando o *pipeline*, um agrupamento não-supervisionado com o algoritmo K-Means (2) para classificar os STDs analisando valores diferentes para K s, a quantidade de classes, pelo método do cotovelo. Deste modo, elaboramos uma metodologia em que STDs são automaticamente classificados com base nas características visuais extraídas pelas CNNs empregadas e em que o número de classes é *a posteriori* avaliado, assemelhando-se ao esquema de Wolfram, porém eliminando a subjetividade intrínseca à atividade humana de rotulação de STDs, além das intempéries consequentes de tal (fadiga, desatenção, etc).

Palavras-chave: Autômato celular. Inteligência artificial. Padrões.

Agência de fomento: CNPq (163174/2021-0)

Referências:

1 WOLFRAM, S. **A new kind of science**. Champaign, IL: Wolfram Media, 2002.

2 MCQUEEN, J. Some methods for classification and analysis of multivariate observations. *In* : BERKELEY SYMPOSIUM ON MATHEMATICAL STATISTICS AND PROBABILITY, 5, 1967, Berkeley. **Proceedings**[...]. Berkeley, 1967. p. 281-297.

IC3

Elaboração de um catálogo de imagens de vasos sanguíneos para o treinamento de algoritmos de aprendizado de máquina

SANTOS, Natália Carvalho; COMIN, Cesar Henrique

naty_dcs@usp.br

Alterações e rupturas de vasos sanguíneos estão relacionadas com diversas doenças. Adicionalmente, a caracterização de vasos sanguíneos possui grande importância para o entendimento do crescimento e atividade da vascularização de tecidos celulares e de neurônios.(1) Portanto, atualmente há uma alta demanda por métodos computacionais que possibilitem identificar e caracterizar com precisão vasos sanguíneos contidos em imagens digitais.(2) Apesar de diversos métodos computacionais terem sido definidos na literatura, a grande maioria dos métodos foram desenvolvidos a partir de bases de dados limitadas, possuindo apenas algumas dezenas de amostras.(3) Como consequência, os métodos tendem a ser específicos para as poucas imagens utilizadas. Neste projeto, propomos construir uma base de imagens de vasos sanguíneos abrangente, possuindo centenas de imagens em alta resolução. Adicionalmente, planejamos utilizar uma abordagem original para a organização dessa base. As imagens serão ordenadas de acordo com propriedades relevantes, como contraste e nível de ruído, e também de acordo com características relacionadas à forma dos vasos, como comprimento e diâmetro. Essa organização possibilitará a verificação sistemática da performance de algoritmos de aprendizado de máquina em diversas situações experimentais. A base gerada será de grande utilidade para que pesquisadores desenvolvam novos algoritmos para o estudo de vasos sanguíneos.

Palavras-chave: Segmentação de imagens. Vasos sanguíneos. Base de dados.

Agência de fomento: FAPESP (2021/13214-5)

Referências:

- 1 MEJIS, M. *et al.* Robust segmentation of the full cerebral vasculature in 4d ct of suspected stroke patients. **Scientific Reports**, v.7, n.15622. 2017.
- 2 TETTEH, G. *et al.* Deepvesselnet: Vessel segmentation, centerline prediction, and bifurcation detection in 3-d angiographic volumes. **Frontiers in Neuroscience**, v.14, p.1285, 2020.
- 3 STAAL, J. *et al.* Ridge-based vessel segmentation in color images of the retina. **IEEE Transactions on Medical Imaging**, v.23, n.4, p.501–509, 2004.

IC4

Modelando o conhecimento por redes complexas.

FONSECA, Matheus; COSTA, Luciano da Fontoura; BENATTI, Alexandre; ARRUDA, Henrique Ferraz de

math.sf.2019@usp.br

Com a crescente disponibilidade de conteúdo científico na World Wide Web (WWW), se torna possível aplicar métodos científicos e matemáticos para investigar a própria ciência. Redes complexas tem sido frequentemente utilizadas como um subsídio para esse tipo de investigação. (1) No presente trabalho, nós desenvolvemos um estudo sobre a organização subjacente do conhecimento em Física e Ciência da Computação por meio da identificação e caracterização das bordas de redes representando subáreas desses campos, derivadas de artigos da Wikipédia. As bordas foram identificadas considerando uma medida chamada acessibilidade dos nós das redes. (2) A análise das redes foi realizada utilizando métodos de estatísticas multivariada, medidas de redes estabelecidas na literatura. (3), bem como uma nova medida chamada externalidade. Os resultados obtidos providenciaram interessantes informações sobre a representação do conhecimento nesses dois campos de estudos. Primeiro, nós pudemos verificar das mediadas topológicas que as redes obtidas tendem a ser bem conectadas, enquanto o grau médio, o número de nós e o coeficiente de aglomeração apresentam variâncias notáveis. Uma correlação positiva foi observada entre a medida externalidade e o menor caminho médio. Outros resultados incluem identificação de algumas subáreas que tendem a ser mais interdisciplinares. Em adição, nós pudemos observar diferentes conexões entre as subáreas considerando borda e os nós centrais (núcleo). Foi também possível observar que o conteúdo dos nós das bordas tendem a ser mais específico e aplicado.

Palavras-chave: Redes Complexas. Borda. Conhecimento.

Agência de fomento: FAPESP (2021/07112-5)

Referências:

- 1 FORTUNATO, S. *et al.* Science of science. **Science**, v. 359, n. 6379, p. eaao0185, 2018.
- 2 TRAVENÇOLO, B. A. N.; VIANA, M. P.; COSTA, L. da F. Border detection in complex networks. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 6, p. 063019, 2009.
- 3 COSTA, L. da F. *et al.* Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.

IC5

Desenvolvimento de nanoestruturas de ouro para modulação da intensidade de emissão de nanomateriais luminescentes

SANTOS, Giulia

giuliaquim@usp.br

Estima-se que a exploração e extração de minas de ouro tenha começado por volta do 5º milênio a.C. Egípcios, chineses e romanos faziam uso do material para construir estátuas, criar artefatos e também para fins curativos.(1-2) Entretanto, apesar da extensa utilização do ouro na antiguidade e dos estudos a seu respeito, somente nas últimas décadas o número de pesquisas e publicações cresceu de maneira significativa. Houve um aumento considerável no número de publicações que descrevem a aplicação do ouro na área de nanotecnologia. Observou-se um crescimento exponencial, que inclui relatos de aplicações avançadas, e deve-se ao contexto da nanociência e nanotecnologia em que o material está inserido.(1-2) O grande interesse em nanoestruturas de metais nobres, como as do ouro, da prata e da platina, surgiu em virtude da possibilidade de aplicação desses materiais em diversas áreas (biomedicina, catálise, eletrônica e fotônica) e das suas propriedades exclusivas (alta estabilidade, síntese química simples e funcionalização de superfície modulável).(3) Neste sentido, o projeto tem como objetivo o estudo das sínteses e caracterizações de nanoestruturas de ouro para a modulação da luminescência de nanopartículas de conversão ascendente de energia, as UCNPs. No trabalho estão descritas as sínteses químicas de quatro nanoestruturas, sendo elas as nanopartículas de ouro, os nanobastões, as nanoestrelas e os nanoprismas. Nos resultados, apresentamos as amostras mais promissoras, e suas respectivas caracterizações através do uso de espectroscopia UV- Visível e microscopia eletrônica de varredura. Foram obtidas com sucesso amostras de nanopartículas e nanobastões, que inclusive tiveram suas dimensões determinadas via microscopia e com auxílio do programa ImageJ. As nanoestrelas foram obtidas com sucesso, porém com alta polidispersividade, não sendo possível atribuir-lhes um tamanho médio. No entanto, as sínteses de nanoprismas resultaram em uma mistura de esferas e prismas, todavia com poucas estruturas prismáticas, o que nos traz a necessidade de uma purificação pós-síntese.

Palavras-chave: Nanoestruturas metálicas. Nanopartículas de ouro. Nanobastões de ouro.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

- 1 ZHANG, Y. *et al.* New gold nanostructures for sensor applications: a review. **Materials**, v. 7, n. 7, p. 5169-5201, 2014. DOI: 10.3390/ma7075169.
- 2 DANIEL, M-C.; ASTRUC, D. Gold nanoparticles: assembly, supramolecular chemistry, quantum-size-related properties, and applications toward biology, catalysis, and nanotechnology. **Chemical Reviews**, v. 104, n.1, p. 293-346, 2004. DOI: 10.1021/cr030698+.
- 3 TOROPOV, N.; VARTANYAN, T. Noble metal nanoparticles: synthesis and optical properties. *In* : ANDREWS, D. L.; LIPSON, R. H.; NANN, T.(ed.). **Comprehensive nanoscience**

and nanotechnology. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 2019. p. 61-88. DOI:
10.1016/B978-0-12-803581-8.00585-3.

IC6

Desenvolvimento de circuito de controle em sistema para aplicação e monitoramento da terapia fotodinâmica de câncer de pele do tipo não melanoma

CARVALHO, Felipe Alvarenga

carvalhofelipe.carvalho@usp.br

A terapia fotodinâmica (TFD) é uma técnica amplamente utilizada para o tratamento de lesões de pele, em especial para o tratamento de câncer de pele do tipo não melanoma. (1) É parte integrante de seu processo de tratamento e monitoramento, a luz, fotossensibilizador e oxigênio molecular. O tratamento é iniciado através da administração epidérmica de ácido delta-aminolevulínico (ALA) ou derivados na região da lesão, o qual é capaz de gerar seletivamente na região tumoral o fotossensibilizador protoporfirina-IX (PpIX). Durante o processo, o equipamento responsável por realizar o tratamento possui um laser que excita o fotossensibilizador, fenômeno que é capaz de gerar espécies reativas de oxigênio, dentre elas o oxigênio singleto, responsável por causar dano celular e morte do tecido alvo através de necrose e apoptose celular. (2) Ao mesmo passo que a excitação do fotossensibilizador promove o tratamento, também há a geração de fluorescência pelo processo de excitação, processo físico que consegue ser captado e transformado em imagens por câmeras digitais, auxiliando no processo de monitoramento do tratamento. O presente estudo é dedicado ao desenvolvimento de uma plataforma de controle integrada, com base no uso de microcontroladores, que será utilizada na integração e aprimoramento de um sistema já existente (3), que desempenha o tratamento e monitoramento em tempo real da TFD através do monitoramento no infravermelho próximo. O estudo compreende o desenvolvimento e aprimoramento do circuito de controle e segurança do módulo laser usado no tratamento, com base no uso do microcontrolador ATmega32U4, através de seus respectivos módulos internos de PWM, Conversor Analógico-Digital e de comunicação USB. O trabalho é relevante pois promove melhorias significativas ao dispositivo de monitoramento da TFD, o qual pode aumentar as taxas de cura dessa modalidade terapêutica.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica (TFD). Monitoramento. Regulação de laser.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 DOLMANS, D. E.; FUKUMURA, D.; JAIN, R. K. Photodynamic therapy for cancer. **Nature Reviews Cancer**, v. 3, n. 5, p. 380–387, 2003.
- 2 DOUGHERTY, T. J. *et al.* Photodynamic therapy. **Journal of the National Cancer Institute**, v. 90, n. 12, p. 889–905, 1998.
- 3 GARCIA, M. R. *et al.* Assembly of a PDT device with a near-infrared fluorescence monitoring of ppix during treatment. **Proceedings of SPIE**, v. 10860, p. 108600T, 2019. DOI: 10.1117/12.2507344.

IC7

Desenvolvimento de nanoestruturas de g-C₃N₄ à partir da pirólise da ureia: estudo da atividade fotocatalítica para geração de H₂ verde

MARCELINO, Giuseppe Braz da Silva; GONÇALVES, Renato Vitalino

giumarcelino@usp.br

A crescente demanda energética mundial nas últimas décadas evidencia drasticamente a necessidade da substituição dos combustíveis fósseis por fontes renováveis de energia. Nesse sentido, um substituto promissor é o hidrogênio, especialmente para transportes pesados e equipamentos de construção que demandam muita energia; por isso, não se adaptam bem à utilização de energia elétrica, muito devido às baixas capacidades de armazenamento das baterias atuais e seu alto preço. Entretanto, a maior parte do hidrogênio produzido atualmente é de origem de combustíveis fósseis, causando assim uma redundância no uso de hidrogênio como forma de remediar os impactos causados pelo uso desses tipos de combustíveis. (1-2) Pensando nisso, a fotossíntese artificial aplicando materiais semicondutores para quebrar a molécula da água, utilizando luz solar como fonte de energia, é uma alternativa plausível e sustentável. Neste contexto, a nanoestrutura de nitreto de Carbono grafítico (g-C₃N₄) é um dos materiais semicondutores com propriedades óticas, eletrônicas e estruturais para a reação de quebra da água em hidrogênio e oxigênio, pela fotossíntese artificial. (3) Este projeto propõe o desenvolvimento de nanoestruturas de nitreto de carbono grafítico (g-C₃N₄) através da pirólise da ureia, que é um método de baixo custo. Nesse sentido, a eficiência fotoquímica do material será testada por meio da geração de hidrogênio na fotossíntese artificial. Além disso, serão depositados co-catalisadores de materiais semicondutor metálicos, com o objetivo de aumentar a eficiência de separação de cargas foto geradas, levando geração de hidrogênio fotocatalítico a partir da quebra da molécula da água. Além disso, serão realizadas simulações computacionais de diagrama de bandas utilizando o modelo clássico, visando aumentar ainda mais o entendimento da estrutura eletrônica desse material.

Palavras-chave: Fotossíntese artificial. Combustível verde. Hidrogênio.**Agência de fomento:** Sem auxílio**Referências:**

- 1 ZHANG, B.; SUN, L. Artificial photosynthesis: opportunities and challenges of molecular catalysts. **Chemical Society Reviews**, v. 48, n. 7, p. 2216–2264, 2019.
- 2 BALL, M.; WIETSCHER, M. The future of hydrogen – opportunities and challenges. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 34, n. 2, p. 615–627, 2009.
- 3 KOHLRAUSCH, E. C. *et al.* A high-throughput, solvent free method for dispersing metal atoms directly onto supports. **Journal of Materials Chemistry A**, v. 9, n. 47, p. 26676–26679, 2021.

IC8

Estudo do processo de incubação na microfabricação com pulsos de femtossegundos em GaN

FERMIANO, Bruna; MENDONÇA, Cleber Renato; TASSO, Kelly

bruna.fermiano@usp.br

A utilização de lasers com pulsos de femtossegundos cresceu muito nas últimas décadas, tanto em pesquisa fundamental quanto em ciência aplicada. Nesta direção, o uso de pulsos de femtossegundos para a microestruturação e microfabricação em materiais tem recebido especial atenção devido ao seu potencial para a confecção de dispositivos Fotônicos. Pulsos laser ultracurtos possibilitam altas intensidades luminosas, as quais promovem efeitos não-lineares que levam a alterações dos materiais apenas em torno do volume focal. Desta forma, a microfabricação com pulsos de femtossegundos permite modificação nos materiais com maior precisão e menos efeitos térmicos. A microfabricação pode ser realizada em praticamente todos os tipos de materiais, sendo necessário conhecer a energia de limiar de dano de cada um. Semicondutores, contudo, se destacam devido a suas propriedades ópticas e eletrônicas, que favorecem a criação de dispositivos fotônicos. Dentre eles, o Nitreto de Gálio (GaN) vem sendo muito utilizado pois, além de possuir propriedades eletrônicas e térmicas favoráveis, também apresenta alta energia de bandgap (maior que 2.2 eV). Além disso, o GaN também apresenta propriedades não-lineares interessantes, como a geração de segundo harmônico e alto índice de refração não-linear. Neste trabalho, será estudada a dependência da energia limiar de dano, induzido por pulsos de femtossegundos, em função do número de pulsos incidentes (incubação) em uma amostra de GaN. O estudo será realizado usando um laser com pulsos de femtossegundos (Yb:KGW) operando em 1030 nm. Pretendemos estudar a influência da duração do pulso no processo de incubação e propor um modelo para explicar como o mecanismo de acumulação de danos, considerado responsável por diminuir a energia de limiar de dano do material, depende da duração dos pulsos. (1-3)

Palavras-chave: Microfabricação. Efeito de incubação. GaN.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 NOLASCO, L. K. **Investigation of the fs-laser micromachining process in GaN and diamond**. 2021. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.
- 2 LIU, J. M. Simple technique for measurements of pulsed Gaussian-beam spot sizes. **Optics Letters**, v. 7, n. 5, p. 196, 1982.
- 3 ALMEIDA, G. F. B. **Estruturação de filmes de silício amorfo hidrogenado induzida por pulsos laser de femtossegundos**. 2014. 82 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

IC9

Implementação e manutenção de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores

PAULI, Ian Giestas; SIPAHI, Guilherme

iangiestas@usp.br

O laboratório de física computacional, o LFC, vem desenvolvendo um software de cálculo de estrutura eletrônica, que permite usar um computador de mesa para realizar cálculos de estrutura de bandas, mesmo em sistemas cuja matriz hamiltoniana não caberia na memória ao usar outros métodos de diagonalização, além disso, o código podia realizar procedimentos auto-consistentes e cálculos feitos em pós-processamento, o que permite caracterizar novos materiais. No entanto, com o passar dos anos e as diversas alterações para a inclusão de novos recursos, o código cresceu sem o planejamento necessário para a sua organização e algumas escolhas tornaram-no pouco prático de usar e realizar melhorias ou implementar novos recursos. Com o intuito de resolver este problema, iniciou-se a escrita de uma nova versão, buscando sanar estas lacunas do projeto. O novo código foi escrito usando fortran moderno e técnicas de orientação a objetos, visando facilitar a introdução de novos hamiltonianos, bem como a configuração por seus usuários, além de tornar possível uma rápida adição de recursos através de uma arquitetura flexível. Além disso, foi integrado um sistema de compilação e gerenciamento de dependências, o *fpm*(1), que permite integrar códigos de propósito geral, o que faz com que se passe mais tempo resolvendo os problemas de Física, do que problemas de ordem técnica. O código agora conta com um programa principal cuja configuração pode ser realizada através de um arquivo de texto plano estruturado em TOML, graças a facilidade da incorporação de sua biblioteca Fortran e com isso é possível controlar o cálculo, os parâmetros dos materiais, método de solução e configurar a geração de gráficos. Outra funcionalidade adicionada é a introdução da possibilidade de incluir novos Hamiltonianos por um arquivo com uma sintaxe idêntica a do fortran, em tempo de execução, ou seja, não é preciso recompilar o código para trocar o modelo a ser usado, por meio de um *parser* simples que usa o algoritmo de Dijkstra, o *shunting yard* (2), desenvolvido em uma biblioteca a parte. É possível definir expressões que podem ser reutilizadas posteriormente ao declarar os elementos da matriz do modelo e utilizar os nomes de parâmetros definidos no arquivo apropriado e também adicionar algumas funcionalidades importantes aos usuários não-programadores, em tempo de execução. É possível definir o método de solução, os parâmetros e modificá-los sem a necessidade de recompilação, e sem precisar programar usando a API desenvolvida. No entanto, o *parser* ainda é muito rudimentar dado a complexidade existente em ter que definir estruturas de dados genéricas em Fortran e ainda não possui suporte a operações unárias (apenas funções, que é como "-" unário é definido). Ainda falta realizar o porte dos cálculos auto-consistentes, cujas alterações estão sendo realizadas por outro colaborador do projeto diretamente no código, o que será um bom termômetro das alterações. Por fim, testes de desempenho e comparação com o código legado precisam ser feitos de modo que se possa medir as diferenças entre os tempos de construção e diagonalização dos hamiltonianos.

Palavras-chave: Fortran moderno. Semicondutores. Parsers.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

1 KEDWARD, L. J. *et al.* The state of Fortran. **Computing in Science & Engineering**, v. 24, n. 2, p. 63-72, 2022, DOI: 10.1109/MCSE.2022.3159862.

2 DIJKSTRA, E.W. **Algol 60 translation:** an Algol 60 translator for the X1 and making a translator for Algol 60. Disponível em: <https://www.cs.utexas.edu/~EWD/MCReps/MR35.PDF>. Acesso em: 26 ago. 2022.

IC10

Quebra de invariância de Lorentz: diferença de tempo de voo entre dois fótons em um universo em expansão

SOUZA FILHO, Luiz Vitor de; MUNDO, Tales Leme

tales.mundo@usp.br

A Relatividade Restrita é, sem dúvida, um dos pilares da física moderna. Sua unificação com a mecânica quântica resultou numa teoria com precisão sem precedentes. Ainda assim, esse modelo não descreve a interação gravitacional e, portanto, sabemos que é incompleto. Diversas tentativas de descrever a gravidade em pequenas distâncias sugerem que a invariância de Lorentz (LI) seja violada (LIV), com os efeitos da violação sendo, em princípio, observáveis em altas energias. Partindo de uma abordagem fenomenológica, podemos mostrar que uma das consequências de LIV é uma mudança na relação de dispersão de fótons no vácuo (1). Neste trabalho, partimos dessa relação e mostramos que a velocidade de propagação do fóton passa a depender da sua energia. Assim, o tempo de voo de dois fótons com energias distintas torna-se diferente. Calculamos essa diferença de tempo para dois fótons originados da mesma fonte em primeira e segunda ordem na métrica FRW. Também discutimos como a observação de raios gama provenientes de fontes astrofísicas impõe limites na escala de energia para LIV de primeira ($E_{LIV}^{(1)} > 7,6 E_{\text{planck}}$) e segunda ($E_{LIV}^{(2)} > 1,3 \times 10^{11} \text{ GeV}$) ordem (2) e como o Cherenkov Telescope Array (CTA) pode ajudar a refinar esses limites.

Palavras-chave: Cosmologia. Raios gama. Quebra de Invariância de Lorentz.

Agência de fomento: FAPESP (2022/02025-0)

Referências:

- 1 MATTINGLY, D. Modern tests of Lorentz invariance. **Living Reviews in Relativity**, v. 8, n. 1, p. 1-84, Dec, 2005.
- 2 VASILEIOU, V., *et al.* Constraints on Lorentz invariance violation from Fermi-large area telescope observations of gamma-ray bursts. **Physical Review D**, v. 87, n. 12, p. 122001, June 2003.

IC11

Elaboração de um Catálogo de Imagens de Vasos Sanguíneos para o Treinamento de Algoritmos de Aprendizado de Máquina

SANTOS, Natália Carvalho; COMIN, Cesar Henrique

naty_dcs@usp.br

Alterações e rupturas de vasos sanguíneos estão relacionadas com diversas doenças. Adicionalmente, a caracterização de vasos sanguíneos possui grande importância para o entendimento do crescimento e atividade da vascularização de tecidos celulares e de neurônios.(1) Portanto, atualmente há uma alta demanda por métodos computacionais que possibilitem identificar e caracterizar com precisão vasos sanguíneos contidos em imagens digitais.(2) Apesar de diversos métodos computacionais terem sido definidos na literatura, a grande maioria dos métodos foram desenvolvidos a partir de bases de dados limitadas, possuindo apenas algumas dezenas de amostras.(3) Como consequência, os métodos tendem a ser específicos para as poucas imagens utilizadas. Neste projeto, propomos construir uma base de imagens de vasos sanguíneos abrangente, possuindo centenas de imagens em alta resolução. Adicionalmente, planejamos utilizar uma abordagem original para a organização dessa base. As imagens serão ordenadas de acordo com propriedades relevantes, como contraste e nível de ruído, e também de acordo com características relacionadas à forma dos vasos, como comprimento e diâmetro. Essa organização possibilitará a verificação sistemática da performance de algoritmos de aprendizado de máquina em diversas situações experimentais. A base gerada será de grande utilidade para que pesquisadores desenvolvam novos algoritmos para o estudo de vasos sanguíneos.

Palavras-chave: Segmentação de imagens. Vasos sanguíneos. Base de Dados.

Agência de fomento: FAPESP (2021/13214-5)

Referências:

- 1 MEJIS,Midas *et al.* Robust segmentation of the full cerebral vasculature in 4d ct of suspected stroke patients. **Scientific Reports**, v.7, n.12 ,2017.
- 2 TETTEH, G. *et al.* Deepvesselnet: Vessel segmentation, centerline prediction, and bifurcation detection in 3-d angiographic volumes. **Frontiers in Neuroscience**, v.14, n.8, p.1285, 2020.
- 3 JOES, S. *et.al.* Ridge-based vessel segmentation in color images of the retina. **IEEE Transactions on Medical Imaging**, v.23, n.4,p.501–509, 2004.

IC12

Busca indireta de matéria escura com o Cherenkov Telescope Array

MAMPRIM, Júlia Gouvea; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de

juliagouveamamprim@usp.br

Dentro do paradigma atualmente aceito sobre o conteúdo do Universo, sabe-se que a maior parte da matéria é constituída de uma substância desconhecida, chamada de Matéria Escura (DM, do inglês *dark matter*), cuja existência se infere por meio de fenômenos astrofísicos e cosmológicos de natureza diversa, como curvas de rotação de galáxia e lentes gravitacionais.(1) Acredita-se que a DM constitui cerca de 85% (2) da matéria do Universo e não pertence ao Modelo Padrão da Física de Partículas. Além disso, supõe-se que a matéria escura seja formada por uma nova partícula elementar neutra, estável e não-bariônica.(3) Em ambientes de alta densidade do Universo, tais como galáxias anãs esferoidais (dSph), galáxias satélites da Via Láctea como a Grande Nuvem de Magalhães (LMC), aglomerados de galáxias e o Centro Galáctico (GC), espera-se que a DM se auto-aniquile, produzindo um forte sinal de raios gama. Neste trabalho, a proposta é analisar modelos de densidade de matéria escura no contexto das curvas de rotação de galáxias e investigar, de acordo com esses modelos, as potencialidades dos telescópios de raios gama - em particular do CTA (Cherenkov Telescope Array) - na futura detecção de um sinal de matéria escura. O projeto tem como foco a busca das melhores fontes candidatas e os melhores métodos de análise a partir da modelagem astrofísica do sinal e do fundo, explorando um dos principais tópicos da física de altas energias: a busca indireta pela matéria escura.

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

Agência de fomento: FAPESP (2022/02102-4)

Referências:

- 1 CLEGG, B. **Dark matter and dark energy:** The Hidden 95% of the Universe. London: Icon Books, 2019.
- 2 ARBEY, A.; MAHMOUDI, F. Dark matter and the early universe: a review. **Progress in Particle and Nuclear Physics**, v.119,p. 103865, Apr. 2021.
- 3 PROFUMO, S. **An introduction to particle dark matter.** London: World Scientific Publishing Europe Ltd., 2017.

IC13

Investigação de derivados de quinazolininas com propriedades anticâncer

COSTA, Felipe Ribaldo Ferreira da; SOUZA, Matheus da Silva

feliperibaldo@gmail.com

De acordo com estimativas da *International Agency for Research on Cancer* (IARC), o mundo registrará um crescimento de 72% dos casos de câncer de próstata (CaP) nas próximas duas décadas, enquanto o Brasil ultrapassará esta marca com um aumento superior a 80%. Trata-se do segundo diagnóstico de câncer mais comum entre os homens e a sexta principal causa de morte por esta doença no mundo. No caso do subtipo metastático e hormônio-refratário (mHRPC, *metastatic and hormone refractory prostate cancer*), as células tumorais não respondem ao tratamento convencional, mantendo-se viáveis e manifestando tumores secundários. (1) Para contornar esta condição, terapias citotóxicas tendo os microtúbulos (MTs) como alvo encontram consagração na prática clínica. Os MTs são componentes estruturais constituídos pela união de dímeros da proteína tubulina, exercendo funções celulares por meio da instabilidade inerente aos processos de polimerização e despolimerização. Modulações desta dinâmica podem conduzir à interrupção da mitose e da invasão celular, sinalizando para apoptose. Estes efeitos podem ser provocados por agentes moduladores do citoesqueleto, representando uma estratégia favorável à busca de fármacos anticâncer. (2) Assim, a proposição de híbridos de quinazolina como moduladores da tubulina exerce papel notável na validação de tratamentos inéditos e pautados na Química Medicinal. Nos últimos 20 anos, moléculas com núcleo quinazolinico foram aprovadas como antitumorais pelo FDA. Entretanto, não há registros de ligantes desta natureza química em fases de testes clínicos para o CaP, reforçando a importância de novas combinações estruturais. (3) Resultados preliminares com 10 derivados de quinazolina mostraram que 3 deles [AQC-02 (1), AQC-04 (2) e AQC-08 (3)] foram ativos na linhagem de CaP (DU-145) e seletivos frente fibroblastos não-tumorais humanos (HFF-1), sendo encaminhados para análise de características verificadas na cascata metastática. Os três compostos foram capazes de inibir a migração celular em ensaios qualitativos *wound healing* em concentração única e concentração x efeito. Neste contexto, o presente projeto de Iniciação Científica traz resultados referentes à continuação da triagem *in vitro* de tais moléculas para o tratamento do mHRPC. Células epiteliais não-tumorais de próstata humana (RWPE-1) foram submetidas a ensaios de viabilidade celular para avaliação da citotoxicidade (CC50) dos derivados pré-selecionados. Estes valores foram empregados juntamente aos de IC50 em DU-145 para o cálculo do índice de seletividade (IS). Os resultados corroboraram que os compostos também são seletivos frente RWPE-1 com $IS \geq 5$. Ademais, foi possível quantificar a capacidade de inibição da invasão de células tumorais em colágeno por meio de ensaio *transwell* baseado em Boyden (IC50 (μ M)): (1) $5,41 \pm 0,55$; (2) $6,88 \pm 0,15$ e (3) $5,69 \pm 0,78$). Ensaios direcionados ao alvo sugeriram que tais moléculas possivelmente interagem com tal proteína no sítio da colchicina ou nas proximidades dele. Desse modo, este trabalho acumulou resultados que suportam a identificação de potenciais candidatos com propriedades desejáveis a novos fármacos para a quimioterapia citotóxica do mHRPC.

Palavras-chave: Câncer de próstata. Química medicinal. Quinazolina.

Agência de fomento: FAPESP (2021/06317-2)

Referências:

- 1 LEUNG, D. K. *et al.* Novel strategies for treating castration-resistant prostate cancer. **Biomedicines**, v. 9, n. 4, p. 339, 2021.
- 2 GUDIMCHUK, N. B.; MCINTOSH, J. R. Regulation of microtubule dynamics, mechanics and function through the growing tip. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 22, n. 12, p. 777-795, 2021.
- 3 MASS, E. B.; DUARTE, G. V.; RUSSOWSKY, D. The quinazoline-chalcone and quinazolinone-chalcone hybrids: a promising combination for biological activity. **Mini-Reviews in Medicinal Chemistry**, v. 21, n. 2, p. 186-203, 2021.

IC14

Triagem de compostos bioativos em linhagem tumoral metastática de próstata

RAFAEL, Larissa Daniela Dias; SOUZA, Matheus da Silva

larissaddias.rafael@usp.br

Considerado como um grave problema de saúde pública, o câncer de próstata (CaP) acomete cerca de 1,3 milhões de novos pacientes anualmente a nível mundial. As fases de progressão da doença direcionam a escolha dos tratamentos mais indicados, incluindo radioterapia e castração por procedimentos cirúrgicos ou medicamentosos. Todavia, um subtipo resistente à castração e metastático pode ser manifestado mesmo após intervenções terapêuticas bem-sucedidas.(1) Diante deste cenário, alternativas farmacológicas baseadas na modulação de alvos compartilhados entre células tumorais e saudáveis encontram validação na prática clínica, como é o caso de terapias direcionadas aos microtúbulos (MTs). Tais estruturas são constituídas por dímeros α e β da proteína tubulina e compõem a rede complexa do citoesqueleto, atuando em uma variedade de funções celulares, como a formação do fuso mitótico, movimentação de organelas e migração celular. Por essa razão, a tubulina tornou-se um dos alvos moleculares mais estudados no desenvolvimento de terapias anticâncer. Agentes químicos capazes de alterar o equilíbrio de polimerização e despolimerização dos MTs por meio de interações com a tubulina podem provocar o bloqueio da mitose, conduzindo as células para apoptose. À vista disso, torna-se evidente a busca por moduladores inéditos desta proteína como potenciais agentes antitumorais.(2) Nestas circunstâncias, a hibridização molecular desponta como uma técnica promissora para obtenção de moléculas estruturalmente diversas e otimizadas. Nos últimos anos, análogos híbridos anticâncer tem acumulado destaque por suas múltiplas ações e/ou contrabalanceamento de efeitos adversos, bem como perfis farmacocinéticos e farmacodinâmicos aprimorados.(3) A partir de resultados obtidos em trabalhos anteriores, três híbridos de quinazolina-chalcona foram selecionados por serem ativos em uma linhagem tumoral metastática de próstata (DU-145) e seletivos frente fibroblastos não-tumorais humanos (HFF-1). Além disso, também foram capazes de promover a inibição da migração celular tumoral em ensaios qualitativos. Perante o exposto, o presente trabalho de Iniciação Científica prosseguiu com a triagem destes compostos bioativos. Para isso, fibroblastos não-tumorais de fígado de camundongo (FC3H) foram utilizados em ensaios de viabilidade celular para determinação da concentração citotóxica (CC50) e cálculo do índice de seletividade (IS) dos compostos pré-selecionados. Os achados experimentais evidenciaram que os ligantes bioativos também são seletivos frente FC3H ($IS > 15$). Os compostos prosseguiram para ensaios bioquímicos com a proteína-alvo, sendo classificados como inibidores de polimerização da tubulina ($IC_{50} \leq 10 \mu M$). Ainda que diferenças pouco expressivas tenham sido constatadas nos ensaios celulares e de modulação do alvo, a potência dos ligantes se manteve na ordem de micromolar para todos os parâmetros determinados. Assim, o estudo destas moléculas de grande diversidade química forneceu informações relevantes sobre padrões estruturais a serem explorados na estratégia de otimização múltipla de parâmetros e na proposição de novas sínteses. Dessa forma, a triagem destes compostos destacou-se por suas contribuições para a Química Medicinal, sobretudo na busca de candidatos favoráveis ao tratamento do CaP metastático.

Palavras-chave: Câncer de próstata. Ensaios celulares. Tubulina.

Agência de fomento: CNPq (143934/2021-0)

Referências:

- 1 WANG, G. *et al.* Genetics and biology of prostate cancer. **Genes & Development**, v. 32, n. 17-18, p. 1105-1140, 2018.
- 2 SHUAI, W. *et al.* Recent progress on tubulin inhibitors with dual targeting capabilities for cancer therapy. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 64, n. 12, p. 7963-7990, 2021.
- 3 AUTI, P. S.; GEORGE, G.; PAUL, A. T. Recent advances in the pharmacological diversification of quinazoline/quinazolinone hybrids. **RSC Advances**, v. 10, n. 68, p. 41353-41392, 2020.

IC15

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

VILLEFORT, Giovanna; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha

gcvillefort@usp.br

A descoberta dos antibióticos revolucionou o tratamento médico reduzindo a mortalidade causada por agentes patogênicos. Porém, o uso indiscriminado desses fármacos tem selecionado microrganismos multirresistentes. Estima-se que cerca de 700.000 mortes por ano sejam atribuídas por infecções resistentes aos antimicrobianos e ainda, se nada for feito, esse número pode chegar a 10 milhões de mortes pelo mesmo motivo em 2050. (1) Em 2017, a Organização Mundial da Saúde publicou uma lista de patógenos para os quais o desenvolvimento de antimicrobianos é urgente. Dentre elas, estão bactérias conhecidas pelo acrônimo “ESKAPE” por possuírem a capacidade de “escapar” da ação de múltiplos antibióticos: *Enterococcus faecium*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa* e *Enterobacter spp.* (2) O objetivo do Laboratório de Epidemiologia e Microbiologia Moleculares (LEMiMo) é encontrar possíveis fármacos a partir de compostos/extratos enviados pelos outros integrantes do Centro de Pesquisa e Inovação em Biodiversidade e Fármacos (CIBFar), um dos CEPIDs da FAPESP. Este projeto visa avaliar a ação antimicrobiana de diferentes compostos frente a várias bactérias ESKAPE. Após uma triagem, serão determinadas: concentração inibitória mínima e concentração bactericida mínima. (3) Além disso, os mesmos compostos serão avaliados quanto à capacidade de erradicação de biofilme formado por *Staphylococcus epidermidis*, *S. aureus* e *A. baumannii*.

Palavras-chave: Resistência bacteriana. ESKAPE. CIBFar.

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

Referências:

- 1 DADGOSTAR, P. Antimicrobial resistance: implications and costs. **Infection and Drug Resistance**, v. 20, n. 12, p. 3903-3910, 2019. DOI: 10.2147/IDR.S234610.
- 2 DE OLIVEIRA, D. M. P. *et al.* Antimicrobial resistance in ESKAPE pathogens. 2020. **Clinical Microbiology Reviews**, v. 33, n. 3, p. e00181-19, 2020. DOI: 10.1128/CMR.00181-19
- 3 CLINICAL LABORATORY STANDARDS INSTITUTE (CLSI). **Methods for dilution antimicrobial susceptibility tests for bacteria that grow aerobically**. 2015. Disponível em: https://clsi.org/media/1632/m07a10_sample.pdf. Acesso em: 10 ago. 2022.

IC16

Estudo de processos dinâmicos em meios porosos por RMN e técnicas físico-computacionais

CAMPOS, Nataly; BONAGAMBA, Tito; OLIVEIRA, Éverton Lucas

natalymelo@usp.br

Em um meio poroso, há constante interação de diferentes fluidos, por exemplo água e óleo, além da comunicação entre regiões de características variadas cujas moléculas encontram-se em movimento de translação devido à autodifusão. Dessa forma, há necessidade de caracterização da estrutura e dinâmica das moléculas de um fluido confinado, como também, obtenção de propriedades físico-químicas do meio petrofísico. Diante desta relevância, a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) apresenta técnicas avançadas e constitui umas das mais importantes ferramentas na caracterização de meios porosos juntamente com a aplicação de técnicas físico-computacionais. Assim, foi utilizado o método computacional de *Random Walk* e, associadamente, foi introduzida a teoria de relaxometria da RMN, a partir da compreensão da dedução da equação de Bloch e processos de difusão descrito pelas Leis de Fick. Desse modo, foram implementados algoritmos análogos ao experimento de CPMG, que podem ser comparáveis a resultados teóricos propostos por Brownstein e Tarr.(1) Em seguida, a fim de analisar a conectividade entre sítios onde as moléculas confinadas encontram-se sob efeitos difusivos, foi realizado computacionalmente e experimentalmente o método de T_2 -Filtered- T_2 -Exchange.(2) Tal experimento é uma nova proposta do Laboratório de Espectroscopia de Alta Resolução por RMN (LEAR/USP), sendo uma implementação do experimento de T_2 - T_2 -Exchange proposto por Lee.(3) Assim, uma das análises consistiu em obter dados experimentais para uma amostra carbonática (*Indiana Limestone*), a fim de observar as curvas de troca entre os diferentes sítios da amostra. Outra análise, consistiu em implementar modelos numéricos das equações de troca, em que foi estudada a máxima intensidade de sinal a ser observado por RMN considerando um modelo de dois sítios, A e B. Estas análises trazem elementos importantes para entender o experimento de *Exchange* entre diferentes poros. O principal desafio do experimento T_2 -Filtered- T_2 -Exchange está em estimar os parâmetros relacionados às taxas de troca. Isso ocorre, pois, a quantidade de magnetização presente na microporosidade, muitas vezes é menor que 5% do sinal total, sendo fortemente influenciada pelo ruído presente no sinal, de modo que esta componente surge na distribuição de tempos de relaxação variando tanto em amplitude quanto em posição quando utilizado o método convencional da transformada de Laplace. Dessa forma, pretende-se aplicar métodos computacionais para Meios Porosos Digitais reconstruídos a partir de imagens de micro tomografia computadorizada de raio-X, a fim de caracterizar a estrutura e dinâmica das moléculas de um fluido, assim como obtenção de propriedades físico-química do meio poroso e consolidação do experimento de T_2 -Filtered- T_2 -Exchange.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Difusão. Meios porosos.**Agência de fomento:** CNPq (143700/2021-9)**Referências:**

- 1 BROWNSTEIN, K. R.; TARR, C. E. Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells. **Physical Review**, v. 19, n. 6, p. 2446-2453, 1979.
- 2 D'EURYDICE, M. N.; MONTRAZI, E. T.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J. T2-Filtered T2-T2-Exchange NMR. **Journal of Chemical Physics**, v. 144, n.20, p. 204201, 2016.
- 3 LEE, J. H. Two dimensional Laplace inverse transform NMR: altered relaxation times allow detection of exchange correlation. **Journal of the American Chemical Society** v. 115, n. 17, p.7761-7764, 1993.

IC17

Engenharia de Band-Gap de Nb₂O₅ para evolução fotocatalítica de H₂ com luz solar simulada

ZAMPAULO, Luís Gustavo Tiveron; GONÇALVES, Renato Vitalino

lg.zam@usp.br

Nióbio é um material com potencial aplicação em diversas áreas como medicina, ótica, eletrônica, catálise e no desenvolvimento de materiais da indústria fina de alta tecnologia. Na corrida tecnológica da utilização do nióbio, o Brasil leva vantagem em relação a outros países por ser detentor da maior reserva de nióbio mundial (98%) (1), porém, ainda existe um longo caminho para a implementação de políticas de utilização do nióbio para o desenvolvimento de tecnologia nacional. Visando explorar a capacidade fotoquímica do elemento nióbio, este projeto propõe estudar a formação de nanoestruturas dos sistemas Nb₂O₅ por meio de um processo de pirólise, além de sua dopagem com Bi. Neste projeto, foi desenvolvida nanoestruturas de óxido de nióbio a fim de se obter elevada eficiência fotocatalítica para geração de hidrogênio através da fotossíntese artificial. Por meio da caracterização dos materiais e de experimentos de geração de H₂ via fotossíntese artificial, obteve-se que a estrutura pseudo-hexagonal a 500°C apresenta atividade fotocatalítica maior que as ortorrômbicas a 600°C e 700°C e que as amostras dopadas com 0.5%, 1% e 2% em peso de bismuto.

Palavras-chave: Band gap. Fotossíntese artificial. Nióbio.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

1. LOPES, O. F. *et al.* Óxidos de nióbio: uma visão sobre a síntese do Nb₂O₅ e sua aplicação em fotocatalise heterogênea. **Química Nova**, v. 38, p. 106-117, 2015.

IC18

Processos de magnetização em magnetos frustrados

CAPELO, Gabriel

gcapelo@usp.br

No estudo de sistemas com momentos magnéticos localizados, denomina-se frustração a incapacidade do sistema de satisfazer todas as interações locais simultaneamente. Nesse projeto temos por objetivo estudar os processos de magnetização, isto é, a resposta em função da aplicação de um campo magnético externo, de sistemas com (rede triangular) e sem (rede quadrada) frustração, comparando os resultados. Estudaremos primeiramente processos a temperatura $T = 0$. Em seguida, investigaremos como flutuações térmicas serão responsáveis pelo levantamento de uma degenerescência accidental no estado fundamental para o caso frustrado. Esse mecanismo é conhecido como ordem por desordem. (1-2) Resultados experimentais para a curva de magnetização em função do campo externo de sistemas magnéticos na rede triangular apresentam um platô de magnetização. (3) Obteremos essa curva de magnetização teoricamente após a introdução das flutuações. Especificamente, estudamos o modelo de Heisenberg Clássico (onde os spins nos sítios da rede são representados por vetores de tamanho S) em redes bidimensionais, com interações antiferromagnéticas entre os primeiros vizinhos $\langle ij \rangle$ e com a presença de um campo magnético externo, dado pela hamiltoniana $H = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - h \cdot \sum_i \vec{S}_i$. Sendo N o número de sítios, definimos a magnetização por spin $m = |\sum_i \vec{S}_i \cdot \hat{h}|/N$. Estamos interessados no gráfico de m em função do módulo do campo h . Para temperatura $T = 0$ obtemos, tanto para a rede quadrada quanto para a triangular, um comportamento linear de m em função de h , até certos campos críticos h_c^{quad} e h_c^{triang} , a partir dos quais os sistemas atingem estados polarizados. No entanto, vê-se que só a rede quadrada pode ser bipartida (isto é, dividida em duas partes em que os sítios de uma não são vizinhos dos da outra). A não bipartição da rede triangular é o que traduz nesse caso a frustração do sistema, e que causa a degenerescência no estado fundamental. Isto posto, passamos a considerar o caso da temperatura $T > 0$, mas ainda muito pequena. Para estudar o efeito dessas flutuações no sistema nós desenvolvemos o que é conhecido como Teoria de Perturbação no Espaço Real. Este método se baseia em considerar que os spins não mais apontam puramente na direção de menor energia, mas apresentam componentes pequenas perpendiculares a ela, causadas por flutuações. Obtemos assim, como resultado, uma correção para a energia livre, que nos permite propor um modelo de hamiltoniana efetiva onde adicionamos à original termos de troca biquadrática $K(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$. Minimizando a nova hamiltoniana, obtivemos a nova curva de magnetização para a rede triangular, que demonstrou um platô de magnetização em $1/3$, concordando com os resultados experimentais. Além disso, pudemos determinar as configurações dos spins nas diferentes fases dos sistema (bem como as transições entre elas), que concordaram com a literatura, o que demonstra de fato o levantamento da degenerescência. O mesmo foi obtido para a rede quadrada, mas no entanto observamos que nesse caso frustrado o único resultado significativo foi um pequeno desvio da curva em relação ao caso $T = 0$, demonstrando o papel fundamental da frustração nesses sistemas.

Palavras-chave: Magnetismo. Frustração. Campo magnético.

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

Referências:

- 1 VILLAIN, J. *et al.* Order as an effect of disorder. **Journal de Physique**, v. 41, n. 11, p. 1263-1272, 1980.
- 2 SHENDER, E. F. Antiferromagnetic garnets with fluctuationally interacting sublattices. **Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics**, v. 56, n. 1, p. 178, 1982.
- 3 SMIRNOV, A. I. *et al.* Triangular lattice antiferromagnet $\text{Rb Fe (Mo O}_4)_2$ in high magnetic fields. **Physical Review B**, v. 75, n. 13, p. 134412, 2007.

IC19

Physarum polycephalum: um modelo biológico de inteligência coletiva

ARRUDA, João Francisco Zani de

jf.za@usp.br

Physarum polycephalum é um protista unicelular, comumente associado a um grupo informal de organismos conhecido por Fungos Mucilaginosos ou *Slime Moulds*, em inglês. Esses organismos têm a capacidade de formar grandes massas, o que os assemelha aos fungos, apesar de não o serem, como sugere o nome. Essa massa é formada por vários indivíduos e cresce pelo ambiente onde se encontra através de pseudópodes, o que a torna especial é exatamente como esse crescimento pode se comportar, mesmo sendo formada por vários organismos diferentes da mesma espécie, eles ainda demonstram alta capacidade de tomada de decisão na busca por alimento, sendo capaz até de resolver labirintos e o problema do menor caminho. (1) As redes formadas pela massa multinucleada do *Physarum* podem servir de exemplo para diversos problemas do mundo real em urbanismo ou para teoria dos grafos, mas nesse estudo estamos interessados em analisar esse comportamento pela visão do Aprendizado de Máquina, mais especificamente o Aprendizado por Reforço, enxergando a sua busca por alimento como recompensas que o Agente recebe para aprender o comportamento que visamos ensinar. Processos de Decisão de Markov e Programação Dinâmica serão fortes aliados para entender as teorias de Aprendizado por Reforço (2) e melhor simular a capacidade de resolver labirintos e o problema do menor caminho assim como o Fungo Mucilaginoso *Physarum polycephalum*, que protagoniza o presente estudo.

Palavras-chave: Reinforcement learning. Aprendizado por reforço. Maze-solving.

Agência de fomento: CNPq (152560/2021-1)

Referências:

- 1 NAKAGAKI, T.; YAMADA, H.; TÓTH, Á. Maze-solving by an amoeboid organism. **Nature**, v. 407, n. 6803, p. 470, 2000. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/35035159> citeas. Acesso em: 02 set. 2022.
- 2 SUTTON, R. S.; BARTO, A. G. **Reinforcement learning**: an introduction. Massachusetts: MIT Press, 2018.

IC20

OccultIn - A web interface based on SORA

PIMENTA, João Victor Alcantara; ROSSI, Gustavo Benedetti; BOUFLER, Rodrigo Carlos; FRAIZ, Maísa Oliveira; SILVA, Mozar Baptista da; ROSSI, Paulina Ferreira

joaovictorpimenta@usp.br

Com o *Legacy Survey of Space and Time* (LSST), do *Vera Rubin Observatory*, e seus planejados dez anos de ininterrupta observação do sul celeste, a astrofísica de corpos do Sistema Solar será revolucionada. Grande parte das descobertas no Sistema Solar serão de pequenos corpos, dos quais espera-se que a quantidade catalogada se multiplique ao menos por dez, comparado ao número atual de corpos do tipo conhecidos. (1) Estes têm tipicamente, para um observador na Terra, magnitudes aparentes maiores que dezesseis e não são ideais de serem estudados por observações diretas pela maioria dos telescópios pequenos ou médios. Nestes casos, o uso de ocultações estelares pode ser de grande valia. Observando a variação de fluxo luminoso causado pela passagem deste corpo em frente à uma estrela, é possível obter grande resolução espacial do evento até a ordem de algumas centenas de metros. A partir de observações do tipo, não só é possível derivar a configuração e formato do corpo medido, como também determinar características do seu arredor. Anéis, atmosfera, satélites e jatos são algumas das possibilidades de descobertas associadas aos eventos de ocultação. (2) Apesar das vantagens, ocultações se trata ainda de astronomia de oportunidade, visto que ocorrem em momentos específicos determinados pelas efemérides e geometrias do corpo, estrela e observador envolvidos. Por isso, uma quantidade razoável dos eventos que são observados o são por astrônomos amadores. Temos uma conjunção notável de grande fluxo de dados a serem gerados pelo LSST e uma quantidade razoável de observadores não especialistas, que motiva a *Occultation Interface* (**OccultIn**) - uma interface online baseada no SORA, que por sua vez é uma biblioteca Python responsável por performar os processos de predição, redução e relacionados usados pela interface. Junto com a *11tech*, equipe de desenvolvedores, se realiza uma interface que, baseada nos processos já bem estabelecidos pelo SORA de predição, análise e redução de curvas de luz, facilite e acelere os processos supracitados para astrônomos interessados em todo o mundo. A interface divide o processo em quatro telas principais: Predição de eventos de ocultação, configuração de curvas de luz do evento, determinação dos observadores e projeção das cordas na esfera celeste junto ao *fitting* de elipses para ajustar o formato do corpo. Com a divisão, o processo de análise e redução se torna mais intuitivo e a interface cumpre sua proposta, pela sequência de telas apresentadas, sugerindo um fluxo ao usuário. No momento de escrita deste resumo o OccultIn tem disponível uma versão para Windows e Linux. Em Linux, é possível executar o programa como servidor, de modo que a aplicação seja acessada por outras máquinas que se conectem à esta. Uma documentação de usuário também está sendo desenvolvida para auxiliar na utilização da aplicação. Apesar de interfaces em geral terem limitações de uso inerentes às escolhas do que é disposto em tela, o OccultIn parece cumprir seu papel, acelerando e facilitando os processos mais comuns.

Palavras-chave: Astrofísica. Ocultações estelares. Python.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 IVEZIĆ, Ž. *et al.* LSST: from science drivers to reference design and anticipated data products. **Astrophysical Journal**, v. 873, n. 2, p. 111, 2019.
- 2 BRAGA-RIBAS. F. *et al.* Database on detected stellar occultations by small outer Solar System objects. **Journal of Physics: conference series**, v. 1365, n. 1, p. 012024, 2019.

IC21

O método de Monte Carlo variacional aplicado a núcleos leves

TONHON, Rafael

tonhonr@usp.br

Estudamos sistemas nucleares, com ênfase em núcleos leves ($A \leq 4$). Analisamos o único estado ligado de dois núcleons, o dêuteron. Em um primeiro momento, utilizamos o modelo do poço esférico para modelar a interação, fazendo-se uso de resultados analíticos e métodos numéricos para reproduzir a energia ($E = -2,22$ MeV) e o raio quadrático médio ($r_{\text{rms}} = 2,10$ fm) experimentais do dêuteron. Mostramos que esse modelo simples é capaz de explicar a fraca ligação do dêuteron e seu tamanho anormal em relação aos demais núcleos. Em seguida, adotamos um potencial mais realístico que leva em conta a existência dos orbitais s e d na função de onda do dêuteron e seu momento de quadrupolo. Para isso, consideramos um potencial que leva em consideração o spin e isospin dos núcleons. (1) Construímos a função de onda utilizando essa interação e, por fim, fomos capazes de formular uma função de onda teste adequada para a aplicação do método variacional de Monte Carlo. Finalmente, apresentamos nossos trabalhos futuros e possíveis direções.

Palavras-chave: Física nuclear. Dêuteron.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

1 MADEIRA, L. **Quantum Monte Carlo studies of strongly interacting Fermionic systems**. 2018. Dissertation (Doctor of Philosophy) Arizona State University, Arizona, 2018.

IC22

Busca por anisotropias nas direções de chegadas de raios cósmicos ultra-energéticos

BRUZAO, Guilherme Leite

guilhermelbruzao@usp.br

Neste trabalho, procuramos estudar os dados do observatório Pierre Auger em busca de anisotropia na direção de chegada de raios cósmicos ultra-energéticos. Para isso, calculamos a exposição relativa do observatório e utilizando o método de *Markov Chain Monte Carlo*, com o algoritmo de Metropolis-Hastings, simulamos céus isotrópicos. Com isso, levando em consideração estudos anteriores da Colaboração Pierre Auger (1-2), selecionaram-se três radiogaláxias próximas da Via Láctea e com características parecidas (Centaurus A, Virgo A e Fornax A) como possíveis emissoras dos raios cósmicos. Sabendo a posição delas no céu, comparou-se a distância angular da chegada de raios cósmicos ultra-energéticos esperados de uma distribuição isotrópica com a distância angular dos eventos medidos pelo observatório Pierre Auger. Com isso, verificou-se que a radiogaláxia Fornax A não parece possuir uma marca de anisotropia no céu, a galáxia de Virgo A está muito no limite de visão do observatório (considerando uma abertura angular zenital de 60°) para que a análise seja efetiva, e a galáxia de Centaurus A, indica uma anisotropia próxima de sua direção no céu, tendo, até uma distância angular de 30° , uma quantidade de eventos medidos muito superior ao esperado sob a hipótese de isotropia.

Palavras-chave: Anisotropia. Raios cósmicos. Centaurus A.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

- 1 AAB, A. *et al.* Searches for anisotropies in the arrival directions of the highest eSnergy cosmic rays detected by the Pierre Auger Observatory. **Astrophysical Journal**, v. 804,n.1,p.1-18, Apr. 2015.
- 2 BIERMANN, P. L.; DE SOUZA, V. Centaurus A: the extragalactic source of cosmic rays with energies above the knee. **Astrophysical Journal**, v. 746, n.1,p.72, Jan. 2012.

IC23

Estudos de modelagem molecular para a descoberta de potenciais inibidores da enzima PI4KIII β de *Plasmodium falciparum*: triagem virtual e métodos de aprendizado de máquina

OLIVEIRA, Gabriela Silva; NOGUEIRA, Victor Henrique Rabesquine

gabrielaslvvr@usp.br

A malária é uma doença infecciosa causada por protozoários do gênero *Plasmodium* ssp. e apesar do sucesso no combate dessa doença, foram reportados 241 milhões de casos e 627 mil óbitos em 2020. O surgimento de parasitos resistentes aos antimaláricos padrões contribui para a persistência desses quadros endêmicos. Dessa forma, é de extrema importância a descoberta de antimaláricos potentes e com mecanismos de ação inovadores. A enzima fosfatidilinositol-4-quinase do tipo III β do *Plasmodium falciparum* (Pf PI4KIII β) é um alvo macromolecular atrativo devido a sua importância no desenvolvimento de múltiplos estágios do parasito. (1) Além disso, sua inibição representa um novo mecanismo de ação diferente dos antimaláricos usuais. Nesse sentido, o objetivo central deste trabalho é o estudo estrutural de um alvo validado e a análise da relação entre estrutura e atividade de compostos para a descoberta de novos inibidores com estruturas e modos de ligação diversos. Em vista disso, construímos um modelo da estrutura tridimensional da enzima através do *AlphaFold colab notebook*. (2) Validamos a estrutura predita através da métrica pLDDT, do valor de RMSD do alinhamento estrutural da enzima predita com a homóloga humana (PDB: 4D0L) e por simulação de dinâmica molecular. Reproduzimos a pose cristalográfica do ligante da enzima humana pela redocagem com o *Gold* (3) e docamos inibidores conhecidos dessa enzima e seus decoys, gerando uma curva ROC próxima de modelos aleatórios de triagem virtual. Também recuperamos inibidores com atividade conhecida contra enzimas homólogas da PI4K no banco de dados ChEMBL e construímos um banco de dados equilibrado com moléculas estruturalmente diversas para classificação da atividade inibitória. Foram treinados modelos de aprendizado de máquina com acurácia de aproximadamente 0.75 para prever compostos potentes contra as proteínas homólogas humanas. Assim, a integração dos estudos em modelagem molecular e os modelos de aprendizado de máquina desse trabalho, possibilitarão a descoberta de potenciais compostos líderes para o tratamento da malária.

Palavras-chave: Malária. PI4K. Modelagem molecular.

Agência de fomento: CNPq (2021-632)

Referências:

- FIENBERG, S. *et al.* Structural basis for inhibitor potency and selectivity of *Plasmodium falciparum* phosphatidylinositol 4-kinase inhibitors. **ACS Infectious Diseases**, v. 6, n. 11, p. 3048-3063, June 2020.
- JUMPER, J. *et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. **Nature**, v. 596, n.

7873, p. 583-589, July 2021.

3 LIEBESCHUETZ, J. W.; COLE, J. C.; KORB, O. Pose prediction and virtual screening performance of GOLD scoring functions in a standardized test. **Journal of Computer-Aided Molecular Design**, v. 26, n. 6, p. 737-748, Feb. 2012.

IC24

Cálculo de espectros de fotoemissão por grupo de renormalização numérico no espaço real

LENZARINI, Marino; OLIVEIRA, Luiz Nunes de

marinopl@usp.br

O objetivo deste trabalho é descrever precisamente o comportamento singular do espectro de fotoemissão de um metal simples nas vizinhanças da frequência limiar, região energética sob a influência da catástrofe de Anderson. (1) Fisicamente, o excesso de energia acima do limiar promove elétrons de condução, inicialmente abaixo do nível de Fermi, para estados acima dele. Para descrever adequadamente tais excitações partícula-buraco, o projeto explorará uma formulação alternativa ao método do grupo de renormalização numérico (NRG) (2), recentemente proposta e apelidada eNRG (3). Em contraste com a construção do NRG, no espaço dos momenta, o eNRG é formulado no espaço real. Ao tempo em que retém as virtudes do método tradicional, o eNRG permite descrever mais fielmente o acoplamento entre bandas de condução e estados localizados. Deste modo, será descrito o modelo da fotoemissão com o eNRG, onde a fotoemissão ejeta um elétron, sem considerar o spin, de um nível profundo para um estado livre com energia pré-fixada, e o Hamiltoniano assume formas diferentes nos estados inicial e final. O estado profundo é então desacoplado da banda, mas no estado final a carga positiva criada pela ejeção gera um potencial de espalhamento com uma intensidade pré-determinada. Assim, é possível calcular a taxa de transição por unidade de tempo a partir da formulação do eNRG, utilizando a regra de ouro de Fermi e entender como resultam os espectros a partir das contribuições de diversos estados finais. É válido notar que esta abordagem permite um amplo estudo do espectro, como sua suavização, o que também será estudado neste trabalho.

Palavras-chave: Grupo de renormalização numérico. Fotoemissão. Singularidades de raios-X.

Agência de fomento: FAPESP (2021/11154-5)

Referências:

- 1 ANDERSON, P. W. Infrared catastrophe in Fermi gases with local scattering potentials. **Physical Review Letters**, v. 18, n. 24, p. 1049, 1967.
- 2 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. **Reviews of Modern Physics**, v. 47, n. 4, p. 773, 1975.
- 3 FERRARI, A. L.; OLIVEIRA, L. N.de. Real-space numerical renormalization group computation of transport properties in side-coupled geometry. **Physical Review B**, v. 106, n. 7, p. 075129, 2022.

IC25

Estudos ópticos espectroscópicos lineares e não lineares em uma nova classe de porfirinas

NASCIMENTO, Carolina Salgado do; BONI, Leonardo de

carol_salgado@usp.br

Na segunda etapa do projeto, teve-se como objetivo a determinação da eficiência quântica de formação de tripleto de duas porfirinas com quatro grupos fluoreno ao redor do seu macrociclo tetrapirrólico, sendo uma porfirina de base livre e uma metaloporfirina de zinco, denominadas aqui de H₂TFluorPor e ZnTFluorPor, respectivamente. É de extrema importância a determinação de suas propriedades na óptica linear, como também não-linear, e a partir de uma análise delas, compreender suas possíveis aplicações dentre uma gama de áreas possíveis, como na medicina, com a fototerapia dinâmica (1), em sistemas de conversão de energia. (2) O estudo das porfirinas consistiu primeiro em medidas espectroscópicas de fluorescência estacionária, obtendo os espectros de absorvidade molar e fluorescência normalizada, como também da eficiência quântica de fluorescência, para finalmente caracterizá-las com medidas de fluorescência resolvida no tempo, visando obter o tempo de vida de fluorescência e a eficiência quântica da formação de tripleto das duas porfirinas em diclorometano (DCM) e dimetilsulfóxido (DMSO). Nos espectros de absorção na região do UV-Vis, observou-se que as bandas são localizadas aproximadamente na mesma região, e nos de fluorescência, ambas apresentaram uma banda, em que para porfirina com o íon metálico ficou mais deslocada para o azul, quando comparada com a de base livre. Os cálculos da eficiência quântica de fluorescência mostraram que a porfirina de zinco dissolvida em DMSO, apresentou um valor em torno de 10%, superior ao da base livre. Já nas medidas de tempos de vida, a porfirina de zinco dissolvida em DCM apresentou o tempo mais rápido de todos, em torno de 1.5ns. Uma vez caracterizadas as eficiências quânticas de fluorescência e os tempos de vida de fluorescência, finalmente foi possível determinar as eficiências quânticas de formação de tripleto para as quatro soluções a partir de uma técnica de duplo pulso laser elaborada no próprio Grupo da Fotônica, na qual se observa a diminuição da fluorescência em função da excitação da amostra por dois pulsos consecutivos de luz laser de alta intensidade separados por 15ns. Com isso, foi usado um modelamento das equações de taxa, em que os dados obtidos anteriormente foram utilizados para aferir a taxa de cruzamento intersistemas. Observamos que essa taxa é mais facilitada para a metaloporfirina, o que pode acontecer devido ao acoplamento spin-órbita pelo átomo de zinco, que favorece essa transferência do estado singleto para o tripleto. (3) Esse resultado mostra que entre ambas as porfirinas, a porfirina de zinco pode ser a melhor empregada para terapia fotodinâmica. Além disso, as taxas de conversão interna apresentaram os maiores valores das demais taxas para ambas as porfirinas, mostrando que elas possuem essa preferência de relaxação e indicando uma possível utilidade para terapia fototérmica.

Palavras-chave: Porfirina. Espectroscopia. Óptica.

Agência de fomento: CNPq (2021-1793)

Referências:

- 1 ETHIRAJAN, M.; CHEN, Y.; JOSHI, P.; PANDEY, R. K. The role of porphyrin chemistry in tumor imaging and photodynamic therapy. **Chemical Society Reviews**, v. 40, n. 1, p. 340-362, Jan. 2011. DOI: 10.1039/b915149b.
- 2 PARK, J. M.; LEE, J. H.; JANG, W.-D. Applications of porphyrins in emerging energy conversion technologies. **Coordination Chemistry Reviews**, v. 407, p. 213157-1-213157-29, Mar. 2020. DOI: 10.1016/j.ccr.2019.213157.
- 3 TANIGUCHI, M.; LINDSEY, J. S.; BOCIAN, D. F.; HOLTEN, D. Comprehensive review of photophysical parameters (ϵ , ϕ_f , τ_s) of tetraphenylporphyrin (H₂TPP) and zinc tetraphenylporphyrin (ZnTPP) - critical benchmark molecules in photochemistry and photosynthesis. **Journal of Photochemistry and Photobiology C: photochemistry reviews**, v. 46, p. 100401-1-100401-61, Mar. 2001. DOI: 10.1016/j.jphotochemrev.2020.100401.

IC26

Medida do índice de refração não-linear em vidros ópticos

INACIO, Anna Cristina Cavallari; MENDONÇA, Cleber Renato

anna.inacio@usp.br

Vidros ópticos são materiais que despertam grande interesse tanto para área de pesquisa básica quanto para aplicações tecnológicas, pois possuem alta não-linearidade óptica, além de oferecerem grande flexibilidade para otimização da resposta não-linear através da manipulação de sua composição. Em específico, vidros óxidos podem ser incorporados com dopantes de elementos altamente polarizáveis, cuja nuvem eletrônica é facilmente deformável na presença do campo eletromagnético, no caso, de um laser de Ti:Safira com pulsos de femtossegundos, gerando uma resposta óptica relevante. Neste trabalho foram estudadas amostras vítreas do sistema $50\text{B}_2\text{O}_3 - 15\text{PbO} - (35-x)\text{LiO}_2 - x\text{Na}_2\text{O}$ através do uso da técnica de varredura-Z, “que permite determinar o índice de refração não-linear através da medida da variação da transmitância em função da posição da amostra em reação ao foco de um feixe laser focalizado”. (1) Nossos resultados indicaram não linearidades relativamente pequenas, da ordem de $1.4 \times 10^{-20} \text{ m}^2/\text{W}$ para a amostra BPLNF20. As imperfeições presentes na amostra causavam um aumento do processo de espalhamento da luz, o que impossibilitou um estudo mais aprofundado neste conjunto de amostras

Palavras-chave: Varredura-Z. Vidros ópticos. Não-linearidade.

Agência de fomento: CNPq (139039/2021-0)

Referências:

1 MENDONÇA, C. R.; MISOGUTI, L.; DALL'AGNOL, F. F.; ZILIO, S. C. Demonstração de um efeito óptico não-linear utilizando a técnica de varredura-Z em uma amostra de chá chinês. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 21, n. 2, p. 272-279, 1999.

IC27

Obtenção da curva de dispersão do índice de refração do espectro de transmissão em interfaces de materiais transparentes

ACOSTA, Inara; MISOGUTI, Lino

inarayasmin@usp.br

O índice de refração é uma das propriedades ópticas fundamentais dos materiais e que determina o funcionamento de dispositivos ópticos em geral. Devido a este fato, já existem inúmeros equipamentos comerciais que são utilizados para a sua determinação, dedicados a diferentes tipos de meios e que utilizam diferentes conceitos físicos como a interferometria, o desvio mínimo e o ângulo crítico, por exemplo. Em adição, é interessante encontrar outras formas de medi-lo de maneira fácil e rápida. Concomitantemente, o índice de refração depende do comprimento de onda, ou seja, tem dispersão, e isto é importante de ser determinado também. Normalmente, a dispersão é determinada a partir de medidas discretas do índice de refração em diferentes comprimentos de onda, ou seja, trata-se de um método relativamente tedioso e demorado. Uma alternativa para determinar tanto a magnitude quanto o espectro é pela medida da curva da transmitância (ou absorbância), mas certos cuidados têm que ser tomados para que valores corretos sejam obtidos, como é mostrado por.(1) Nesse contexto, propomos realizar um estudo sistemático para a determinação tanto da magnitude quanto da curva de dispersão do índice de refração de diferentes meios através da curva de transmitância obtida num espectrofotômetro comercial. O objetivo do projeto foi caracterizar amostras de diferentes vidros ópticos com diferentes espessuras de forma a determinar a contribuição da absorção do meio para que ela possa ser removida da curva de transmitância. Os resultados com e sem a contribuição da absorção foram encontrados e comparados com os valores da literatura citados.(2)

Palavras-chave: Óptica. Índice de refração. Dispersão.

Agência de fomento: CNPq (2021-2376)

Referências:

- 1 ROBB, P. N.; MERCADO, R. I. Calculation of refractive indices using Buchdahl's chromatic coordinate. **Applied Optics**, v. 22, n. 8, p. 1198-1215, 1983.
- 2 NUSSBAUMER, M. *et al.* A simple method for the determination of refractive indices of (rough) transparent solids. **Journal of Materials Science**, v. 40, n. 3, p. 575-582, 2005.

IC28

Absorção multifotônica em perileno

BARBEDO, Artur; PELOSI, André; VALVERDE, João Victor; OSPINA, Orlando Marbello

artur.barbedo@usp.br

Moléculas orgânicas têm sido alvo de diversos estudos e aplicações em Fotônica, principalmente depois do advento do laser em 1960. Tais compostos possuem características estruturais interessantes para aplicações em óptica. (1) Em específico, essas moléculas são amplamente utilizadas no regime da óptica não linear, quando a intensidade da luz de excitação é comparável com o campo eletromagnético interatômico. Alguns processos não lineares, como microfabricação, microscopia por fluorescência excitada e armazenamento óptico, permitem o avanço tecnológico em diversas áreas. Neste projeto, temos como objetivo estudar os efeitos não lineares no perileno, uma molécula orgânica, em específico a absorção de dois fótons. O perileno e seus derivados já são utilizados em algumas aplicações, como em dispositivos optoeletrônicos, em lasers de corante e sensores de gás, por conta da sua alta fluorescência. (2) Entre as técnicas disponíveis, se destaca a Varredura-Z (Z-Scan) (3), sendo utilizada nesse projeto. Essa técnica consiste, em termos gerais, na variação da posição da amostra pelo eixo do feixe, analisando a transmitância normalizada. Além disso, foram realizadas medidas de parâmetros lineares, como absortividade molar, eficiência quântica de fluorescência, tempo de vida de fluorescência, coeficiente de anisotropia e diferença de momento de dipolo entre o estado fundamental e o estado excitado, determinados por técnicas espectroscópicas lineares. O material apresentou características fotofísicas interessantes, sendo um bom indicador para boas respostas não lineares. Espera-se que o perileno tenha alta seção de choque de absorção de dois fótons, sendo então útil para a fabricação de novas tecnologias.

Palavras-chave: Óptica não linear. Absorção multifotônica. Perileno.

Agência de fomento: FAPESP (2021/02612-0)

Referências:

- 1 PRASAD, P. N.; WILLIAMS, D. J. **Introduction to nonlinear optical effects in molecules and polymer**. New York: John Wiley Sons, 1991. 320 p.
- 2 ZHANG, F. *et al.* Self-assembly, optical and electrical properties of perylene diimide dyes bearing unsymmetrical substituents at bay position. **Scientific Reports**, v. 8, p. 8208-1-8208-11, 2018.
- 3 SHEIK-BAHAIE, 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.

IC29

g-2 com um modelo para $R(s)$

MANSUR, Lucas Morethes; BOITO, Diogo Rodrigues

lucasmansur@usp.br

O momento magnético anômalo do múon, g_μ , é um observável fundamental da física de partículas. A previsão da equação de Dirac, $g_\mu = 2$, recebe pequenas correções quânticas — advindas da troca de partículas virtuais — no contexto do modelo padrão. Com a medida experimental recente de $g_\mu - 2$ do múon feita pelo Fermilab (1), este observável mostra agora uma tensão de 4.2σ em relação às previsões do modelo padrão. (2) Entender a origem desta discrepância é um importante problema da física atual, que indica a necessidade de revisões dos cálculos envolvendo as correções no valor de $g_\mu - 2$. O presente trabalho dedica-se a estudar e reproduzir os resultados clássicos para g_μ da Equação de Dirac e da primeira correção obtida na eletrodinâmica quântica, calculada por Julian Schwinger. (3) Em seguida, pretende-se elaborar um modelo simples para a seção de choque e^+e^- em hádrons, de forma que a contribuição de $g_\mu - 2$ advinda da parte hadrônica da polarização do vácuo possa ser extraída, com o uso de uma relação de dispersão.

Palavras-chave: Teoria Quântica de Campos. Múon g-2. Modelo padrão.

Agência de fomento: FAPESP (2022/01502-9)

Referências:

- 1 ABI, B. *et al.* Measurement of the positive muon anomalous magnetic moment to 0.46 ppm. **Physical Review Letters**, v. 126, n. 14, p. 141801-1-141801-11, Apr. 2021.
- 2 AOYAMA, T. *et al.* The anomalous magnetic moment of the muon in the Standard Model. **Physics Reports**, v. 887, p. 1-166, Dec. 2020.
- 3 SCHWINGER, J. On quantum electrodynamics and the magnetic moment of the electron. **Physical Review Journals**, v. 73, n. 4, p. 416-417, Feb. 1948.

IC30

Similaridade genética de estreptococos do grupo B isolados de humanos na Paraíba

TORINI, Luciana; PEREZ, Vinícius Pietta; DINIZ, Pedro S.; SILVA, Larissa Rodrigues dos Santos; QUEIROZ, Suellen B.; GOMES, Jorhanna Isabelle A. de Brito; LUNDGREN, Patrícia U.; SANTOS FILHO, Lauro; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha

lucianatorini@gmail.com

O *Streptococcus agalactiae*, ou *Streptococcus* do grupo B (GBS), é um colonizador assintomático do trato digestivo e geniturinário de adultos saudáveis e é causador de doenças neonatais e agente de infecções em imunocomprometidos e idosos. (1) As infecções do trato urinário, causadas por GBS em gestantes estão relacionadas ao aborto espontâneo, morte fetal intrauterina, corioamnionite e ruptura da membrana amniótica, causando partos prematuros. As drogas de escolha para o tratamento ou profilaxia da infecção por GBS em humanos incluem penicilina e cefalosporinas, seguidas de clindamicina ou macrolídeos e, por último, vancomicina. (1) O uso clínico da tetraciclina em humanos é limitado devido à resistência. Além da profilaxia antimicrobiana, a implementação de uma vacina baseada nos tipos prevalentes de polissacarídeo capsular rico em ácido siálico (CPS) para gestantes é uma estratégia promissora para prevenir a doença neonatal e infantil causadas por GBS. (2) GBS expressam dez tipos de CPS (Ia, Ib, II-IX), portanto a descrição dos sorotipos prevalentes em uma região é crucial para o desenvolvimento de vacinas. Caracterizamos 75 GBS isolados de diferentes espécimes clínicos de pacientes ambulatoriais de João Pessoa - PB. Determinamos os tipos capsulares dos isolados por PCR multiplex (3) e sua suscetibilidade à penicilina, eritromicina, vancomicina, clindamicina, levofloxacina, cloranfenicol, tetraciclina e linezolida por disco de fusão, de acordo com o CLSI; a concentração inibitória mínima (CIM) da penicilina foi determinada por E-test. Analisamos a clonalidade dos isolados usando macrorestrição de DNA seguida de eletroforese em gel de campo pulsado. Houve alta diversidade de clones de GBS entre os pacientes ambulatoriais da comunidade da Paraíba, com os 75 isolados agrupados em 45 pulsotipos (pulsotipos 1-45). Quatro isolados eram CPS não tipáveis. Cinquenta e oito dos setenta e cinco isolados eram resistentes à tetraciclina, uma característica das cepas GBS adaptadas ao homem. Além da resistência à tetraciclina, cinco isolados foram resistentes à clindamicina, três ao cloranfenicol, cinco à eritromicina e um à levofloxacina. Seis isolados mostraram sensibilidade com exposição aumentada, um para cloranfenicol, três para eritromicina e dois para tetraciclina. Todos os isolados foram suscetíveis à penicilina e as CIM50 e CIM90 foram 0,047 mg/L e 0,064 mg/L (intervalo de 0,023 a 0,094 mg/L). Em conclusão, os sorotipos Ia e V apresentaram a maior ocorrência entre os isolados, e os pacientes da comunidade da Paraíba ainda podem contar com as principais alternativas antibióticas para tratar infecções por GBS.

Palavras-chave: *Streptococcus agalactiae*. GBS. Sorotipo capsular.

Agência de fomento: FAPESP (FAPESP 2019/23684-9; PIBIC, FAPESQ)

Referências:

- 1 AIEWSAKUN, P. *et al.* Genomic epidemiology of *Streptococcus agalactiae* ST283 in Southeast Asia. **Scientific Reports**, v. 12, p. 4185-1-4185-13, 2022. DOI: 10.1038/s41598-022-08097-0.
- 2 CARRERAS-ABAD, C. *et al.* Vaccine against group B *Streptococcus* : recent advances. **Infection and Drug Resistance**, v. 13, p. 1263-1272, 2020. DOI: 10.2147/IDR.S203454.
- 3 IMPERI, M. *et al.* A multiplex PCR assay for the direct identification of the capsular type (Ia to IX) of *Streptococcus agalactiae*. **Journal of Microbiological Methods**, v. 80, n. 2, p. 212-214, 2010.

IC31

Modelagem matemática do movimento de forrageio do *Physarum polycephalum*

FLORENTINO, Bruno Rafael; FONTANARI, José Fernando

brunorf1204@usp.br

Existem os mais diversos organismos na natureza, cada um com suas características únicas, nesse contexto o protozoário *Physarum polycephalum* exibe um curioso comportamento, pois uma agregação com incontáveis unidades dessa espécie é capaz de se auto-organizar e em seguida navegar em ambientes complexos com o objetivo de encontrar comida. Dado esse comportamento, o mesmo foi estudado com o objetivo de implementar um modelo computacional capaz de simular o forrageio dessa espécie de protozoário. Ademais, temos que os modelos presentes na literatura (1) apenas descreviam o comportamento do protozoário quando já estava sobre as fontes de alimentação, então fundamentalmente foi adicionado dois elementos novos aos modelos da literatura para conseguir realizar essa descrição, esses elementos são o de quimiotaxia e de memória espacial. O primeiro se refere à capacidade de sentir um odor e utilizar o seu gradiente de concentração para se locomover no espaço, que no contexto estudado esse agente químico tem como fonte as regiões em que a agregação de protozoário se alimenta. Adiante, o segundo elemento está relacionado com a capacidade de guardar informações de posições visitadas anteriormente e utilizá-las na tomada de decisão, mais especificamente o sistema de memória é armazenado externamente através de um hormônio nas regiões já visitadas. Após a construção do modelo foi estudado seu comportamento em algumas condições iniciais, principalmente dentro de uma armadilha em formato de U. (2) Em relação a isso foi constatado que o protozoário da simulação consegue escapar da armadilha e encontrar a fonte de alimentação, comportamento análogo ao organismo in vivo. Por fim, temos que esse resultado sugere que a quimiotaxia junto com a memória espacial são elementos que juntos conseguem explicar os mecanismos que governam o comportamento dessa espécie de protozoário.

Palavras-chave: Movimento de animais. Forrageio. Auto-organização.**Agência de fomento:** PUB-USP (2021-2997)**Referências:**

- 1 GUNJI, Y.- P. *et al.* An adaptive and robust biological network based on the vacant-particle transportation model. **Journal of Theoretical Biology**, v. 272, n. 1, p. 187-200, Mar. 2011.
- 2 REID, C. R. *et al.* Slime mold uses an externalized spatial “memory” to navigate in complex environments. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 109, n. 43, p. 17490-17494, Oct. 2012.

IC32

Desenvolvimento de reator para monitoramento in situ dos parâmetros de reação e emissão de quantum dots

ROSA, Mabily Bilancieri; CAMARGO, Andrea Simone Stucchi de

mabily_bilancieri@usp.br

Os *quantum dots* (QD) ou pontos quânticos são nanopartículas semicondutoras que possuem importantes propriedades espectroscópicas, as quais estão diretamente relacionadas ao seu tamanho devido ao efeito de confinamento quântico. Este efeito implica em uma diminuição da energia do *bandgap* do semicondutor à medida em que os QDs crescem. (1) Por isso a caracterização dessas nanopartículas, que é usualmente feita através da espectroscopia de absorção e emissão, pode também dar informações sobre suas dimensões. Para isso, é comum retirar alíquotas de amostra durante a reação de síntese para realizar tal caracterização (a esse procedimento nos referimos como metodologia *ex situ*), porém esse método não oferece informações que ocorrem durante a reação e que podem ser importantes para o processo de formação dos QDs. Em vista disso, a metodologia do monitoramento *in situ*, desenvolvida neste trabalho, visa aprimorar a análise de dados, isto é, obter um acompanhamento contínuo da reação. (2) QDs de CdTe, CdS e CdSe têm sido de grande interesse pois suas emissões cobrem quase todo espectro visível, do verde até o infravermelho próximo, viabilizando muitas aplicações, como por exemplo, em sensores, eletrônicos e bioimageamento. Foram realizadas medidas espectroscópicas dos QDs de CdTe utilizando as abordagens *ex situ* (absorção e emissão, QDs obtidos à 90°C) e *in situ* (emissão, QDs obtidos à 100°C), a fim de entender as propriedades e características dessas nanopartículas e comparar tais métodos. Com relação aos QDs de CdS e CdSe, suas sínteses e caracterizações foram realizadas na segunda etapa do projeto, visando uma futura aplicação em concentradores solares. Para esses QDs foi aplicada apenas a metodologia *ex situ* (absorção e emissão, QDs obtidos à 90°C) por enquanto. Com os espectros de absorção obtidos das amostras foi possível determinar o diâmetro médio das nanopartículas com base no método de Tauc, (3) mostrando que com o passar do tempo de reação, há uma maior distribuição do tamanho das nanopartículas e aumento diametral. Os espectros de emissão dão informação quanto à distribuição de tamanhos e, com relação aos QDs de CdTe, foi observado que o espectro obtido à 90°C levou mais tempo para atingir um comprimento de onda específico do que a reação feita à 100°C, indicando que a temperatura de reação influencia no crescimento das nanopartículas. Com relação ao monitoramento *in situ*, houve uma continuidade no deslocamento do espectro para mais baixas energias, revelando a evolução da reação e aumento do tamanho dos QDs. Deste modo, o objetivo desse projeto é sintetizar e caracterizar QDs de CdTe, CdS e CdSe e, desenvolver um sistema de monitoramento *in situ* (planejamento do reator e conectores) para estas sínteses, visando aprimorar as condições reacionais e, conseqüentemente, a qualidade estrutural-funcional do produto final.

Palavras-chave: Quantum dots. Monitoramento in situ. Luminescência.

Agência de fomento: CNPq (119581/2021-3)

Referências:

- 1 RAVARO, L. P.; FORD, P. C.; de CAMARGO, A. S. S. Optical oxygen sensing by MPACapped CdTe quantum dots immobilized in mesoporous silica. **Microporous and Mesoporous Materials**, v. 303, p. 110237-1-110237-12, Aug. 2020. DOI: 10.1016/j.micromeso.2020.110237.
- 2 TERRASCHKE, H.; ROTHE, M.; LINDENBERG, P. In situ monitoring metal-ligand exchange processes by optical spectroscopy and X-ray diffraction analysis: a review. **Reviews in Analytical Chemistry**, v. 37, n. 1, p. 20170003-1-20170003-22, Mar. 2018.
- 3 VIEZBICKE, V. *et al.* Evaluation of the Tauc method for optical absorption edge determination: ZnO thin films as a model system. **Physica Status Solidi**, v. 252, n. 8, p. 1700-1710, Aug. 2015.

IC33

Prospecção teórica para a otimização do método da Razão de Intensidade de Luminescência em Termometria Óptica

QUADROS, Thales; BERNARDEZ, Andrea Simone Stucchi de Camargo Alvarez

thaleseduardoqb@usp.br

A medição de temperatura por meio da luz (termometria óptica) está cada vez mais em ascensão em ambientes cujas técnicas já estabelecidas sofrem interferência (como em estações de energia devido a presença de campos elétricos) ou possuem limitações ambientais e espaciais (como em ambientes químicos tóxicos e circuitos eletrônicos, na escala micro- ou nanométrica). (1) Uma das técnicas mais populares de termometria óptica é baseada na Razão de Intensidade de Luminescência (RIL), que se vale de duas emissões radiativas de níveis eletrônicos distintos cujas intensidades variam em função da variação de suas populações eletrônicas devido à mudança de temperatura. (2) Essa técnica é largamente aplicada a emissões de íons terras raras trivalentes devido às suas características peculiares como estreitas larguras espectrais. (2) A aplicação da RIL é possível devido ao fato de alguns dos níveis eletrônicos destes íons serem termicamente acoplados, ou seja, a diferença de energia entre eles é da ordem da distribuição térmica de Boltzmann, tal que podem ser acoplados por pacotes de energia vibracional. (2) Na abordagem contida neste trabalho o principal objetivo foi estudar quais os pares de emissões em (3) (e em que íons terras raras) são mais adequados para o emprego do método da RIL. Dessa forma, a partir dos parâmetros de Judd-Ofelt - uma teoria bem estabelecida, formulada para a descrição das emissões radiativas de íons terras raras em matrizes hospedeiras, uma análise foi feita para a verificação das condições que permitem otimizar este método de termometria indireta.

Palavras-chave: Termometria de Luminescência. Medições indiretas. Distribuição de Boltzmann.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 JAQUE, D.; VETRONE, F. Luminescence nanothermometry. **Nanoscale**, v. 4, n. 15, p. 4301–4326, 2012
- 2 SUTA, M.; MEIJERINK, A. A theoretical framework for ratiometric single ion luminescent thermometers: thermodynamic and kinetic guidelines for optimized performance. **Advanced Theory and Simulation**, v. 3, n. 12, p. 1-27, 2020.
- 3 CARNALL, W. T.; CROSSWHITE, H.; CROSSWHITE, H. M. **Energy level structure and transition probabilities in the spectra of the trivalent lanthanides in LaF₃**. United States. 1978. Disponível em: <https://www.osti.gov/servlets/purl/6417825>. Acesso em: 07.12.22. DOI: 10.2172/6417825.

IC34

Buscando matéria escura com raios gamma de alta energia

RAMOS, Maria Eliza de Melo; VIANA, Aion da Escóssia Melo

mariaeliza@usp.br

Nos dias de hoje, é amplamente aceito pela comunidade científica que a densidade de matéria do universo consiste, sobretudo, de uma componente desconhecida chamada de matéria escura (do inglês *dark matter*, DM), considerando que esta seja formada por uma nova partícula fundamental neutra, estável e não-bariônica. Em ambientes do universo com alta densidade, DM pode se auto-aniquilar ou decair, produzindo um forte sinal de raio gamma (raio- γ). (1) Os aglomerados de galáxias são os maiores objetos virializados já observados, e sua principal componente de massa é a matéria escura (DM), correspondendo a cerca de 80% do percentual, com o resto sendo provido por gás dentro do aglomerado (cerca de 15%) e por galáxias (5%). Consequentemente, aglomerados de galáxia são fortes candidatos a conter uma quantidade considerável de sinal de raios- γ de alta energia. Este trabalho visa compreender o fluxo diferencial de raios- γ e o fator relacionado à distribuição de DM nos halos galácticos, chamado *J-factor*, aplicando a teoria no nosso centro galáctico primeiro, e então generalizando para aglomerados. (2) A presença de subestruturas de matéria escura na forma de super densidades autolimitadas dentro do halo principal de um aglomerado pode impulsionar (*boost*) o sinal de aniquilação e/ou decaimento, o que diferencia um pouco o estudo do J-factor em aglomerados de galáxias. (3) Desta maneira, teremos uma lista de aglomerados com os maiores fatores de aniquilação e decaimento. Isto também permite uma comparação entre o fluxo diferencial de raios- γ com a sensibilidade de atuais detectores, como o Fermi-LAT, assim como de futuros observatórios, como o Cherenkov Telescope Array (CTA). Por conseguinte, telescópios terrestres, ainda em desenvolvimento, são considerados por último, onde analisamos sua janela de observação do céu em relação à posição dos aglomerados de galáxias com maiores J-factors, identificando os melhores alvos de cada telescópio.

Palavras-chave: Matéria escura. Raios-gamma. J-factor.

Agência de fomento: FAPESP (2021/00131-4)

Referências:

- 1 VIANA, A. E. M. **Indirect searches of dark matter, and the galactic center at very high energy with H.E.S.S.** 2012. Thèse (Docteur en Sciences) – Université Paris, Paris, 2012.
- 2 CIRELLI, M. *et al.* **PPPC 4 DM ID: a poor particle physicist cookbook for dark matter indirect detection.** 2012. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1012.4515.pdf>. Acesso em: 10 jul. 2022.
- 3 SÁNCHEZ-CONDE, M.A.; PRADA, F. **The flattening of the concentration-mass relation towards low halo masses and its implications for the annihilation signal boost.** 2014. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1312.1729.pdf>. Acesso em: 10 jul. 2022.

IC35

Avaliação da atividade antibacteriana da luz ultravioleta em solução nutritiva de hidroponia.

CORREA, Bruna Carolina; PEREZ, Shirley Marleny Lara; BAGNATO, Vanderlei Salvador

bruna.ccorrea@outlook.com

A introdução de vários sistemas agrícolas inteligentes, a produção de produtos de alta qualidade das plantas verdes têm atraído cada vez mais atenção. A hidroponia apresenta vantagens como produção de alimentos de qualidade com menos recursos, como também a redução de riscos causados pelos patógenos de solo (1), contudo, a reutilização da solução nutritiva utilizada no cultivo, pode facilitar a disseminação de microrganismos patogênicos. Por isso, métodos de descontaminação de fluidos hidropônicos como agentes oxidantes, filtros, tratamento térmico e radiação da luz ultravioleta - UV-C (254nm) têm sido utilizados.(2) A vantagem da luz UV-C como controle microbiológico é inativar uma ampla diversidade de microrganismos, o que, contudo, requer a seleção de uma dose adequada. Entretanto, o ajuste da dose de luz para que ocorra a otimização de danos no DNA microbiano é necessário. O objetivo desta pesquisa é avaliar a atividade antibacteriana de luz ultravioleta (UV-C) em fluido hidropônico e avaliar os efeitos das substâncias que compõe a solução nutritiva do cultivo hidropônico. Os resultados mostram que não houve alteração na condutividade elétrica da solução hidroponia após 144h da utilização da luz ultravioleta. Utilizando o UV-C em doses de 20,37 mJ/cm² ocorreu uma redução de *Escherichia coli* de 1,7 log (UFC/mL), já em doses de 489,02 mJ/cm² a redução bacteriana se manteve. Quando adicionado mais uma nova bomba de submersão para impedir a decantação das bactérias para o fundo do galão, utilizando a mesmas doses de luz 20,37 mJ/cm² e 489,02 mJ/cm², ocorreu uma inativação de 4,2 log (UFC/mL) e 5,2 log (UFC/mL) respectivamente. Com esse trabalho conseguimos avaliar a ação antibacteriana, na qual, inativou até 5 log (UFC/mL) bactéria inoculada na solução nutritiva, mostrando uma maior eficiência quando utilizado a bomba de submersão impedindo a sedimentação da *Escherichia Coli*.

Palavras-chave: Hidroponia. Luz ultravioleta. Dose de luz.

Agência de fomento: CNPq (143605/2021-6)

Referências:

- 1 KIM, B.-S.; YOUM, S.; KIM, Y.-K. Sterilization of harmful microorganisms in hydroponic cultivation using an ultraviolet LED light source. **Sensors and Materials**, v. 32, n. 11, p. 3773–3785, Oct. 2020.
- 2 SCARLETT, K. *et al.* Efficacy of chlorine, chlorine dioxide and ultraviolet radiation as disinfectants against plant pathogens in irrigation water. **European Journal of Plant Pathology**, v.145,n.1, Oct.2015.DOI: 10.1007/s10658-015-0811-8.

IC36

Estudo da absorção de dois fótons em derivados fluorescentes de Benzotiadiazol: determinação da magnitude do brilho

AKIYAMA, Júlia; LIMBERGER, Jones; BONI, Leonardo de

julia.akiyama@usp.br

Visando uma possível aplicação em marcadores fluorescentes (1), este trabalho teve como objetivo o estudo o efeito de absorção de dois fótons em derivados fluorescentes de Benzotiadiazol, os quais foram estudados comparados com o efeito de grupos diferentes ligados ao núcleo.(2) Sendo assim, quatro derivados BTD foram analisados quanto suas mudanças nas propriedades fotofísicas devido à efeitos de agregação através da caracterização óptica linear e não linear. As propriedades fotofísicas foram cuidadosamente analisadas em termos da influência dos distintos grupos laterais doadores de carga (elétrons) ligados ao núcleo aceitador de carga. Estes foram feitos utilizando técnicas de espectroscopia óptica de absorção e fluorescência. Através da análise das bandas de absorção, emissão de fluorescência e do efeito solvatocrômico, foi possível avaliar o comportamento de transferência líquida de carga interna, entre o estado fundamental e o excitado das moléculas. Quanto à óptica não linear, as moléculas foram estudadas para determinar a seção de choque de absorção de dois fótons e sua magnitude do brilho, pela técnica de Varredura-Z com laser de pulsos ultracurtos. Além disso, foi analisado o controle da eficiência quântica de fluorescência induzida pela A2F quando agregados moleculares são formados.O estudo revelou que a inserção de grupos laterais ao núcleo BTD alterou significativamente algumas propriedades fotofísicas, demonstrando efeito do aumento de fluorescência com a formação de agregados (Aggregation-induced Emission). Essa propriedade junto com a seção de choque de absorção de dois fótons determina o brilho de dois fótons (brightness) dessas moléculas e sustentam seu uso em sistemas biológicos, principalmente, como sondas fluorescentes como controle de processos intracelulares. Dos quatro compostos estudados, apenas dois apresentaram um aumento do brilho induzido pela absorção de dois fótons quando agregados, sendo esses os que possuem o grupo lateral metoxiariloxi, diferente de seus análogos altamente simétricos.Em suma, neste trabalho foi verificado a influência da mudança de grupos doadores ao núcleo 2,1,3-benzothiadiazol. A alteração da arquitetura com eixo de simetria dos compostos BTD-4 e BTD-3 para torna-los novos compostos não centrossimétricos, com o grupo metoxiariloxi, demonstrou afetar na dinâmica de transferência de energia no estado excitado e, devido a isso, foi observado o efeito Aggregation-Induced Emission (AIE) para estas moléculas. Para complementar esse estudo e analisar comprimentos de onda penetráveis em tecidos biológicos, foi obtido a seção de choque de absorção de dois fótons, via técnica de Varredura-Z, para analisar outro parâmetro crucial que é a propriedade da magnitude do brilho de dois fótons (brightness). Foram encontrados valores entre 20 e 50 GM de seção de choque de A2F na região espectral com certa penetrabilidade em tecidos biológicos. Foi visto também um decréscimo do valor da A2F em cerca de 10 GM entre os compostos análogos, tendo menores valores para aqueles que apresentaram emissão engrandecida via agregação.

Palavras-chave: Optica não linear. Espectroscopia. Caracterização.**Agência de fomento:** FAPESP (2021/07354-9)

Referências:

- 1 KHADRIA, A. *et al.* Push–pull pyropheophorbides for nonlinear optical imaging. **Organic & Biomolecular Chemistry**, v. 15, n.4, p. 947-956,2017.
- 2 PAZINI,A. *et al* Designing highly luminescent aryloxy-benzothiadiazole derivatives with aggregation-induced enhanced emission, **Dyes and Pigments**, v.178,p.108377,Mar. 2020.DOI:10.1016/j.dyepig.2020.108377.

IC37

Sistemas de spins interagentes: resultados na rede quadrada e nos aproximantes de quase-cristais

MIRALHAS, Vinícius de Souza; ANDRADE, Eric

vinicius.miralhas@usp.br

Um magneto cuja hamiltoniana descreve o modelo de Ising é formado por uma rede de spins interagentes, no qual cada sítio de spin-1/2 interage apenas com seus vizinhos próximos. Tipicamente, magnetos deste modelo apresentam a existência de uma fase (anti)ferromagnética de ordenamento espontâneo para baixas temperaturas e uma fase paramagnética a altas temperaturas, ambas separadas por uma temperatura crítica. Propriedades termodinâmicas do sistema, como energia média, capacidade térmica e susceptibilidade magnética, assim como a magnetização, dependem da temperatura. É de interesse físico mapear o comportamento destas quantidades com o aumento da temperatura, assim como avaliar seus perfis assintóticos na proximidade da transição de fase. (1) A rede quadrada infinita e periódica é um modelo estatístico conhecido e tem soluções exatas para todas as quantidades mencionadas. (2) Neste trabalho, desenvolvemos um programa em Fortran que utiliza métodos estocásticos de Monte Carlo para estudarmos antiferromagnetos em dois tipos de rede: malhas quadradas com condições abertas de contorno e aproximantes 2D de Ammann-Beenker para quase-cristais. O primeiro método implementado foi o de Metropolis, cuja operação consiste em inverter a orientação de um sítio aleatório da rede contanto que o novo estado do sistema respeite a distribuição de Boltzmann e suas imposições de ergodicidade. Constatamos a dependência do tamanho da rede e temperatura com a quantidade de varreduras necessárias para atingir o equilíbrio térmico do sistema. Avaliamos as quantidades termodinâmicas do magneto pelo método de blocos, aumentando a confiabilidade dos resultados. (2) Constatamos a dificuldade de convergência na faixa da temperatura crítica de transição de fase e a corrigimos com o algoritmo de aglomerados de Wolff, cuja aplicação inverte simultaneamente um aglomerado de spins. Calculamos o cumulante de Binder (3) para ambos os tipos de rede, provendo a determinação qualitativa da temperatura crítica. Aplicamos o método de *finite-size scaling* aos dados provenientes das simulações numéricas e estudamos a faixa de confiança para cada expoente crítico na região de transição de fase a partir da minimização da distribuição χ^2 com ajustes polinomiais. (3) Verificamos que para as duas redes os expoentes críticos são os mesmos, mas que a temperatura de transição é distinta, embora o número médio de primeiros vizinhos para o quase cristal seja igual ao da rede quadrada.

Palavras-chave: Modelo de Ising. Expoentes críticos e transição de fase. Métodos de Monte Carlo.

Agência de fomento: PUB-USP (843)

Referências:

- 1 SIMON, S. H. **The Oxford solid state basics**. Oxford: Oxford University Press, 2013.
- 2 NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. **Monte Carlo methods in statistical physics**. Oxford: Clarendon Press, 1999.

3 SANDVIK, A. W. Computational studies of quantum spin systems. **AIP Conference Proceedings**, p. 135-338, 2010. DOI:10.1063/1.3518900.

IC38

Espectroscopia óptica e resolvida no tempo de porfirina base livre contendo átomos de platina e paládio: possível aplicação em microbiologia

CROCE, Julia Nonato; IGLESIAS, Bernardo Almeida; GARCIA, Rafael; BONI, Leonardo de

juliacroce@usp.br

Quando se trata do estudo de novas moléculas, há uma vasta gama de métodos que podem ser utilizados para a obtenção das informações desejadas. Mais especificamente, quando queremos analisar se a molécula em questão é elegível para aplicações em áreas como a biofotônica, cumprindo a função de fotossensibilizador, a espectroscopia óptica (1) é um método amplamente utilizado, pois o estudo da interação luz-matéria é capaz de oferecer diversas informações sobre as estruturas eletrônicas da molécula em questão. Neste trabalho, foram estudadas três moléculas da classe de porfirinas, moléculas orgânicas do grupo de proteínas comumente utilizadas em aplicações como terapia fotodinâmica, cujas características fotofísicas ainda eram desconhecidas. As moléculas estudadas foram a H2TSPyP, PdTSPyP e PtTSPyP, cuja estrutural central é a padrão de porfirinas, com o anel tetrapirrólico, sendo o diferencial a presença de grupos periféricos, alguns contendo átomos dos metais platina e paládio. As amostras foram diluídas em DMSO, formando uma substância de concentração final de 10^{-4} Molar que foi utilizada nas análises posteriores. Inicialmente foram feitas as análises dos espectros de absorção das três substâncias, onde foi possível observar que a absorção do anel central se manteve a mesma, com a banda de Soret em 415 nm e bandas Q's em 507 nm, 540 nm e 581 nm, sendo as únicas distinções as presenças de bandas N's na faixa de 310 nm a 330 nm presentes nas porfirinas com átomos metálicos. Posteriormente foram realizadas as medições dos espectros de fluorescência, que se apresentaram os mesmos para as três amostras. Com os valores dos espectros de absorção e fluorescência foram calculadas as eficiências quânticas de fluorescências (ϕ_F) através do método de Brouwer (2), onde se utiliza uma amostra de referência cujo ϕ_F é bem conhecido, nesse caso, foi utilizada a hematoporfirina diluída em DMSO. As amostras apresentaram valores baixos para ϕ_F , sendo de 1% para a H2TSPyP e 2% para as porfirinas metálicas, indicando que os átomos pesados nas periferias das moléculas têm uma função estabilizadora que proporciona uma estrutura planar para as moléculas, aumentando a dissipação de energia por meios radioativos. Posteriormente foram avaliados os tempos de vida de fluorescência através do estudo de fluorescência resolvida no tempo, sendo da ordem de 10ns para as porfirinas com metais e 8ns para a porfirina de base livre. Por fim, com esses dados, foi feita a análise da eficiência quântica da formação de estados tripletos (ϕ_T) através da técnica do duplo pulso (3), com resultados da ordem de 38% para as três amostras. Estes resultados sugerem que as três moléculas dissipam a maior parte da energia absorvida de maneira térmica, com a presença dos átomos metálicos proporcionando apenas um pequeno aumento na taxa de desativação por meio radiativo devido a planarização da estrutura da molécula, reduzindo suas torções. Com isso, as três porfirinas podem ser utilizadas tanto como fotossensibilizadores para tratamentos de terapia fotodinâmica, devido a alta conversão para estados tripletos, quanto para ativações térmicas de terapias fotodinâmicas, sendo a H2TSPyP a mais adequada para aplicações em termo-terapia.

Palavras-chave: Espectroscopia. Terapia fotodinâmica. Porfirinas.

Agência de fomento: CNPq (139044/2021-3)

Referências:

- 1 KOU, J.; DOI, D.; YANG, L. Porphyrin photosensitizers in photodynamic therapy and its applications. **Oncotarget**, v. 8, n. 46, p. 81591-81603, 2017.
- 2 BROUWER, A. Standards for photoluminescence quantum yield measurements in solution. **Pure Applied Chemistry**, v. 83, n. 12, p. 2213-2228, 2011.
- 3 JORNADA, D. C. *et al.* Investigation of the triplet excited state and application of cationic meso-tetra(cisplatin)porphyrins in antimicrobial photodynamic therapy. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 35, p. 102459-1-102459-9, Sept. 2021.

IC39

Estudo de fluxo de fluidos em meios porosos digitais utilizando técnicas físico-computacionais

SELLIN, Davi; FERREIRA, Arthur Gustavo de Araújo; BONAGAMBA, Tito José

sellin_ifsc@usp.br

O projeto de iniciação científica descrito neste documento tem como intuito de aliar os estudos desempenhados no âmbito da fluidodinâmica a ferramentas de cunho computacional, explorando os limites do conhecimento no campo da dinâmica de fluidos computacional. Pretende-se expor resultados de escoamentos estudados e também evidenciar como as conclusões associadas possuem significativa importância no estudo de fluxo de fluidos simulados em meios porosos digitais, influenciando direta ou indiretamente no desenvolvimento de possíveis novas técnicas de recuperação de recursos naturais armazenados em rochas das mais diversas natureza, tais como petróleo e gás natural. Visando a consolidação da temática proposta pelo projeto, além de toda base teórica em fluidodinâmica direcionada não somente ao entendimento da natureza de um fluido e os estados da matéria os quais esse é passível de assumir, mas também à compreensão dos tipos de comportamento que um escoamento pode assumir (1), lançou-se mão de algoritmos computacionais oferecidos pelo software open-source OpenFOAM. Este consiste em um programa escrito na linguagem C++ operado no terminal do Ubuntu/Linux projetado para lidar com problemas de qualquer natureza que envolvam a solução de equações de campo, expandindo seu escopo para além da dinâmica de fluidos computacional, como por exemplo eletromagnetismo e até mesmo casos que envolvam a modelagem de eventos relacionados ao mercado financeiro. Essencialmente, empregou-se dois tipos de algoritmos em todos os casos estudados: SnappyHexMesh e simpleFoam. (2) O primeiro foi utilizado para a geração do ambiente virtual no qual o escoamento em questão seria simulado, enquanto o propósito do segundo foi, efetivamente, realizar a simulação do fluxo analisado resolvendo a forma geral da equação de conservação para cada um dos pontos contidos na malha associada, contanto que o fluido tratado seja incompressível e esteja em regime estacionário. Por fim, em virtude da ausência de uma interface gráfica vinculada ao OpenFOAM, a visualização dos fluxos estudados se deu através do software open-source Paraview. Como o foco do projeto foi simular escoamentos que se aproximassem das condições físico-químicas proporcionadas por meios porosos, foram geradas uma série de resultados com uma mesma temática em comum: analisar como um determinado escoamento se comporta quando o meio pelo qual escoar possui um objeto de natureza obstrutiva. Dentre os principais resultados obtidos, é válido ressaltar e discutir dois exemplos: primeiro, quando o escoamento em questão é obstruído por um objeto de seção transversal quadrada constante e, segundo, quando, sob as mesmas condições anteriores, a seção transversal possui geometria alterada para circular constante. Em suma, é possível afirmar que todos os resultados obtidos estão em concomitância com os fundamentos teóricos abordados pelo autor deste projeto. As ferramentas computacionais empregadas atuaram de maneira excepcional, confeccionando imagens que permitiram um entendimento mais interativo dos efeitos da fluidodinâmica na vida cotidiana. Além disso será possível gerar malhas que correspondem a espaços porosos comumente estudados experimentalmente, como aqueles criados pelo empacotamento de esferas de vidro e comparar experimento e simulação.

Palavras-chave: Dinâmica de fluidos. RMN. Meios porosos.

Agência de fomento: CNPq (143460/2021-8)

Referências:

1 YOUNG, H. D. *et al.* **Sears & Zemansky física II: termodinâmica e ondas.** 12. ed. São Paulo: Pearson, 2008.

2 **OpenFOAM:** manual pages v2112. Disponível em:
<https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/man/index.html>. Acesso em: 7 de set. de 2022.

IC40

A cooperação na evolução pré-biótica

MARIANO, Matheus Stefanini; FONTANARI, José Fernando

matheussmariano@usp.br

Os seres vivos não são as únicas entidades sujeitas ao processo evolucionário. A evolução atua na Terra antes mesmo do surgimento da primeira célula, quando apenas moléculas povoavam o planeta. Como o próprio nome sugere, a evolução pré-biótica consiste no processo de evolução molecular que precedeu o surgimento da vida. Uma das principais teorias que explicam a evolução pré-biótica é conhecida como modelo de quase-espécies. (1) Esse modelo descreve a dinâmica de macromoléculas autorreplicantes influenciadas por dois mecanismos evolutivos antagônicos: seleção natural e mutação. Uma quase-espécie é um conjunto de sequências semelhantes, as quais podem ser de qualquer entidade sujeita ao processo evolucionário e portadora de informação, submetidas a um processo contínuo de mutação e seleção natural. O modelo resulta em um sistema de equações diferenciais que descrevem a evolução das frequências dos diferentes tipos de moléculas que compõem a população. A abordagem matemática do modelo possibilita a análise de qualquer população de entidades que se autorreproduzem. Para se compreender mais profundamente a dinâmica evolucionária das quase-espécies, criou-se um programa que simula a evolução de populações de sequências a partir da solução numérica das equações do modelo. Para isso, utilizou-se uma abordagem que diminui a quantidade de equações diferenciais a serem resolvidas. (2) Foram analisados quatro tipos de dinâmicas evolutivas através das simulações. Na primeira dinâmica, denominada relevo adaptativo de pico íngreme, observa-se dois regimes distintos: o regime de quase-espécie e o regime estocástico. No primeiro regime, macromoléculas mutantes coexistem de forma estável com uma sequência dominante. No segundo, a informação genética é totalmente perdida. Esses dois regimes são separados por uma probabilidade crítica de mutação, a qual indica a existência de uma complexidade máxima para as moléculas nas condições pré-bióticas, o que resulta em um problema teórico relacionado ao desenvolvimento da complexidade na Terra, conhecido como paradoxo de Eigen. A segunda dinâmica estudada consiste em um relevo adaptativo de dois picos íngremes, em que se observou a competição entre quase-espécies. No terceiro tipo de dinâmica, analisou-se o relevo adaptativo de um pico suave, no qual as sequências mutantes desempenham um papel de destaque, de tal forma a desfazer a transição entre os dois regimes. Na última dinâmica, estudou-se a competição entre o relevo adaptativo de pico íngreme e o de pico suave, o que enfatizou a importância das sequências mutantes na competitividade da quase-espécie. Além disso, foi estudado o modelo de hiperciclos (3), o qual resolve o paradoxo de Eigen através de um mecanismo de cooperação (catálise) entre as moléculas da população. Esse modelo explica a interação altamente coordenada entre ácidos nucleicos e proteínas, a qual é fundamental para estabelecer o vínculo entre informação biológica e função biológica. Estudou-se a competição entre replicadores malthusianos, replicadores hipercíclicos com replicação apenas enzimática e replicadores hipercíclicos com replicação enzimática e replicação malthusiana (completos). A partir dessas análises, conclui-se que os replicadores hipercíclicos completos possuem uma vantagem seletiva em relação aos outros dois tipos de replicadores, pois podem se replicar mais tanto em altas frequências (replicação enzimática) quanto em baixas frequências (replicação malthusiana).

Palavras-chave: Evolução pré-biótica. Evolução molecular. Dinâmica evolucionária.

Agência de fomento: PUB-USP (197)

Referências:

- 1 EIGEN, M. Selforganization of matter and the evolution of biological macromolecules. **Naturwissenschaften**, v. 58, n. 10, p. 465-523, Oct. 1971.
- 2 SWETINA, J.; SCHUSTER, P. Self-replication with errors: a model for polynucleotide replication. **Biophysical Chemistry**, v. 16, n. 4, p. 329-345, Dec. 1982.
- 3 MICHOD, R. E. Population biology of the first replicators: on the origin of the genotype, phenotype and organism. **American Zoologist**, v. 23, n. 1, p. 5-14, Feb. 1983.

IC41

Introdução à teoria dos espinores e twistores

PÊGAS, Juan Vitor; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla; FERREIRA, Carlos Henrique Grossi

juanvitorpegas123@outlook.com

Desde a formulação da Relatividade Geral (GR) e da Teoria Quântica de Campos (TQC), diversos métodos geométricos ocuparam cada vez mais o centro das atenções da Física Teórica. Dentre eles, o que mais se destacou foi o conceito de espinores, blocos fundamentais de uma TQC relativística. Porém, é amplamente aceito que o “quadro geral” está incompleto, faltando um formalismo totalmente consistente que abarque esses dois ramos bem sucedidos da Física. Visando este problema, Penrose em 1967 introduz, utilizando espinores, o conceito de twistores. (1-2) Neste formalismo, o espaço-tempo complexificado é visto como uma variedade emergente de um espaço projetivo de twistores (espaço dos raios de luz). (1) Dessa forma, estabelece-se uma relação não-local entre os eventos do espaço-tempo e os pontos do espaço projetivo. Neste trabalho, estudamos o formalismo espinorial e como ele dá lugar aos twistores e sua relação com a estrutura causal do espaço-tempo de Minkowski. Por fim, estudamos a relação entre os chamados twistores newtonianos (limite newtoniano dos twistores relativísticos) e o papel da gravidade no colapso da função de onda. (3)

Palavras-chave: Gravitação. Espinores. Twistores.

Agência de fomento: FAPESP (2022/02663-6)

Referências:

- 1 PENROSE, R. Twistor algebra. **Journal of Mathematical Physics**, v. 8, n. 2, p. 345-366, 1967.
- 2 PENROSE, R.; RINDLER, W. **Spinors and space-time**. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1986. (Cambridge Monographs on Mathematical Physics, v. 2).
- 3 DUNAJSKI, M.; PENROSE, R. **Quantum state reduction, and Newtonian twistor theory**. 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2203.08567.

IC42

Evolução fotocatalítica do CO₂ sob emissão de luz UV - visível em nanopartículas de BiVO₄ produzidas via síntese hidrotermal

VIEIRA, Gabriel Natulini; GONÇALVES, Renato Vitalino

gabriel_natulini@usp.br

Nosso planeta passa por uma crise energético – ambiental muito grave, com um aquecimento global excessivo intrinsecamente atrelado à emissão intensa de gás carbônico (CO₂) na atmosfera. Portanto, surge uma necessidade de se estudar os mecanismos que regem a redução fotocatalítica do CO₂, permitindo que esse gás seja convertido em produtos de alto valor agregado, trazendo uma funcionalidade ao poluente e interesse econômico no investimento de políticas ambientais. (1) Assim, este trabalho teve como foco sintetizar nanopartículas de BiVO₄ puro via síntese hidrotermal (2), obtendo com êxito a fase monoclinica, reportada na literatura como um dos fatores principais para um desempenho ótimo da reação fotocatalítica. (3) Ademais, as imagens obtidas por (MEV) reportaram um caminho promissor para as nanopartículas sintetizadas, as quais já apresentam facetas bem definidas e que, após a reação de fotoredução, geraram produtos de fase líquida, com destaque para o metanol. Vale ressaltar que os resultados obtidos via XPS, Espectroscopia Raman e UV-Vis reportaram características condizentes com o material sintetizado e os estudos contidos na literatura.

Palavras-chave: CO₂. Redução fotocatalítica. BiVO₄.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 NGUYEN, H. L. Reticular materials for artificial photoreduction of CO₂. **Advanced Energy Materials**, v. 10, n. 46, p. 2002091, Dec. 2020. DOI: 10.1002/aenm.202002091.
- 2 HAN, Q. *et al.* Elegant construction of ZnIn₂S₄/BiVO₄ hierarchical heterostructures as direct Z-scheme photocatalysts for efficient CO₂ photoreduction. **ACS Applied Materials Interfaces**, v. 13, n. 3, p. 15092-15100, 2021.
- 3 LIU, Y. *et al.* Selective ethanol formation from photocatalytic reduction of carbon dioxide in water with BiVO₄ photocatalyst. **Catalysis Communications**, v. 11, n. 3, p. 210-213, 2009.

IC43

Investigação dos efeitos de curvatura no estado fundamental de um condensado de Bose-Einstein dipolar em uma armadilha de casca esférica

YELISETTY, Karla; HENN, Emanuel Alves de Lima

karlayelisetty@usp.br

O estudo dos condensados de Bose-Einstein é uma área em expansão que se mostra relevante na Física moderna. São analisadas hoje diversas técnicas que possibilitam a manipulação de gases quânticos, sendo uma delas a deformação geométrica. Esse tipo de deformação nos permite alterar a topologia do condensado, já que o aspecto geométrico desses condensados podem ser modificados por meio de técnicas de aprisionamento. Gases polarizados como Cromo, Érbio e Disprósio são casos em que a interação dipolo-dipolo exerce importante influência. Diferentemente das interações usuais de curto alcance, a interação dipolar tem longo alcance e exerce efeito generalizado no condensado. Por essa razão, gases dipolares aprisionados em armadilhas isotrópicas tendem a assumir formatos anisotrópicos, como aqueles que estão aprisionados harmonicamente e tendem a se alongar na direção de polarização. Em uma pesquisa de mestrado feita no grupo, houve um estudo desse problema por métodos variacionais, com foco no estado fundamental. (1) A análise foi do comportamento das partículas acumuladas no equador de uma armadilha sob condições específicas e foi determinado um ponto de saturação onde esse acúmulo não pode ser mais estreito ao redor desse equador. No início desse projeto, foi estudado, a partir dessas análises teóricas anteriores, a expansão da dimensão dos parâmetros já analisados, checando se os padrões já observados se mantêm para raios maiores de armadilha. À medida que as simulações foram sendo feitas e os padrões foram se revelando, fomos aumentando a magnitude do quanto esses raios variam e as inconsistências encontradas nos levaram a olhar também para outros parâmetros como o número de termos no ansatz angular e os parâmetros de interação magnética. Porém, a investigação variacional demanda ferramentas matemáticas muito pesadas, além de se tornar limitada quando as análises não podem mais se apoiar sobre hipóteses simplificadas. Estamos então, investigando de forma computacional, por meio de simulações da equação de Gross-Pitaevskii, gases dipolares em cascas esféricas. Partindo dos resultados já obtidos em uma casca fina e o trabalho de Sun *et al.* (2) na transição entre uma armadilha harmônica convencional e uma casca fina, investigaremos o estado fundamental de um condensado de Bose-Einstein com interações dipolares nesse contexto.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Interação dipolar longo alcance. Armadilha esférica.

Agência de fomento: CNPq (126183/2022-8)

Referências:

1 DINIZ, P. C. *et al.* Ground state and collective excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap. **Scientific Reports**, v. 10, p. 4831-1-4831-10, Mar. 2020. DOI: 10.1038/s41598-020-61657-0.

2 SUN, K. *et al.* Static and dynamic properties of shell-shaped condensates. **Physical Review A**, v. 98, n. 1, p. 013609-1-013609-24, July 2018.

IC44

Estudos de reações relevantes para a astrofísica usando o Brazilian Nuclear Potential

CESSEL, Gabriel; GASQUES, Leandro Romero

cessel@usp.br

De maneira geral a compreensão da nucleossíntese estelar e da evolução de estrelas massivas advém do estudo da fusão de dois núcleos formando um novo núcleo composto. O presente projeto investiga três reações de extrema importância para a astrofísica: $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, $^{12}\text{C} + ^{16}\text{O}$, $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$, dando destaque à primeira reação citada, cujo impacto em cenários astrofísicos é evidenciado em (1). A análise é baseada em um potencial de interação nuclear. Recentemente, uma nova abordagem teórica para a parte real da interação nuclear foi proposta pelo nosso grupo, abordagem essa que foi denominada Brazilian Nuclear Potential (BNP). Modelo estruturado em dois principais ingredientes: a distribuição de densidade do núcleo e a interação nucleon-nucleon. A fim de calcular a seção de choque de fusão, utilizamos o BNP dentro do contexto do formalismo de canais acoplados, onde acoplamos estados excitados dos núcleos presentes na reação para a realização dos cálculos. Esses cálculos foram performados utilizando o código FRESCO. (2) Um potencial imaginário, $W(r)$, é adotado para simular a correspondente absorção pelo processo de fusão, sendo, portanto, diretamente ligado a probabilidade de fusão de cada valor de J (onda parcial). E assim, podemos calcular também a seção de choque de fusão total. (1) Na nossa abordagem o potencial imaginário é proporcional à uma convolução das distribuições de densidades de matéria dos núcleos reagentes. Convencionalmente, as seções de choque de fusão em baixas energias (região de energia de interesse para a astrofísica) são representadas pelo então chamado fator S^* astrofísico modificado (uma modificação de escala na análise), o qual é proporcional ao parâmetro de Sommerfeld, à energia do centro de massa e uma constante g que varia de acordo com a reação analisada. Com o fito de reproduzir a magnitude e o comportamento ressonante dos dados obtidos do fator S^* astrofísico, foram utilizados três parâmetros ajustáveis: N_r , N_i e X , relacionados à parte real e imaginária do potencial óptico, respectivamente. Variações no parâmetro N_i inferem em uma modificação na largura e magnituded as seções de choque de fusão. As correspondentes posições dos centróides de cada ressonância podem ser ajustadas por pequenas modificações na parte real da interação nuclear. Por esse motivo, para cada valor de J , o BNP foi multiplicado por um fator de normalização N_r .

Palavras-chave: Fusão nuclear. Nucleossíntese estelar. Potencial nuclear.

Agência de fomento: FAPESP (2021/04332-4)

Referências:

- 1 GASQUES, L. R.; CHAMON, L. C.; CESSEL, G. P. The role of inelastic couplings on the $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ fusion at sub-barrier energies. **European Physical Journal A**, v. 58, n. 6, p. 102-1-102-5, 2022.
- 2 THOMPSON, I. J. Coupled reaction channels calculations in nuclear physics, **Computer Physics Reports**, v. 7, n. 4, p. 167-212, 1988.

IC45

Estudos de espectroscopia óptica estacionária e resolvida no tempo em novas moléculas de corróis base livre

FRANÇA, Diego; BONI, Leonardo de

diegofdeoliveira@usp.br

O projeto tem como objetivo a caracterização espectroscópica de uma dupla de corróis com dois ligantes laterais de pentafluorofenil, sendo distinguíveis por seu terceiro ligante característico, um com carbazol (Cbz-corrol) e outro com fenotiazina (Ptz-corrol). Compreender seu comportamento fotofísico é importante para descrever seus processos de conversão de energia e, dessa forma, descobrir o melhor tipo de aplicação para estas moléculas. (1) Primeiramente é feito o estudo de absorção e fluorescência estacionária para as amostras dissolvidas em diclorometano (DCM) e dimetilsulfóxido (DMSO). Foi possível obter a eficiência quântica de fluorescência (Φ_f) para cada uma das amostras em solução através de um método indireto, por comparação com uma amostra de referência. É feita análise dos tempos de vida da fluorescência (τ_f) utilizando um laser pulsado de femtossegundos. Por fim, é utilizada uma técnica com excitação por duplo pulso laser a fim de observar a formação de estados tripleto entre os pulsos, o que resulta na eficiência de formação de triplete (Φ_T). Com todos os valores determinados, é possível calcular as taxas de decaimento das moléculas em solução. O espectro de absorção das moléculas se mostrou bastante semelhante entre todas as soluções. As moléculas dissolvidas em DMSO, no entanto, apresentaram abertura da banda de solet proveniente da tautomerização das espécies em solução, sofrendo também alterações em suas bandas Q pelo mesmo motivo. Foi descoberto que as amostras dissolvidas em solvente mais polar, de DMSO, apresentaram maior eficiência quântica de fluorescência. Apesar disso, os tempos de vida de fluorescência permaneceram semelhantes para todas as amostras, sendo próximos a 4ns para todas as amostras. Dada a estabilidade de τ_f e o aumento de Φ_f , consequentemente houve um aumento das taxas radiativas nas amostras dissolvidas em DMSO, acompanhada de uma diminuição das taxas não-radiativas. Esse efeito foi atribuído à presença dos grupos laterais dos corróis, que são capazes de formar ligações de hidrogênio em solventes polares graças aos átomos de flúor do grupo pentafluorofenil, bastante eletronegativos. As ligações estabilizam o movimento desses ligantes, tornando a molécula mais rígida e menos propensa a dissipar energia de forma não-radiativa. (2) Esse efeito foi capaz de quase dobrar a eficiência quântica de fluorescência da amostra Cbz-Corrol, passando de 2.4 em DCM para 4.4 em DMSO. Essa amostra em DMSO também apresentou o menor Φ_T , indicando que o ligante lateral de carbazol aumenta a conversão interna da molécula, o que pode ser explicado por sua capacidade trocar energia com o anel central, evidenciado em um estudo anterior. (3) A amostra Ptz-Corrol manteve uma eficiência de tripletização de 30% no solvente mais polar, o que pode ser explorado para aplicações em terapia fotodinâmica em pesquisas futuras.

Palavras-chave: Fluorescência. Espectroscopia. Óptica.**Agência de fomento:** FAPESP (2021/07350-3)

Referências:

- 1 AVIV, I.; GROSS, Z. Corrole-based applications. **Chemical Communications**, n. 20, p. 1987-1999, 2007. DOI: 10.1039/B618482K.
- 2 GOTARDO, F. *et al.* Investigating the intersystem crossing rate and triplet quantum yield of Protoporphyrin IX by means of pulse train fluorescence technique. **Chemical Physics Letters**, v. 674, p. 48-57, Apr. 2017. DOI: 10.1016/j.cplett.2017.02.055.
- 3 SHIVAPRASADACHARY, B. *et al.* Light induced intramolecular energy and electron transfer events in carbazole–corrole and phenothiazine–corrole dyads. **Journal of Porphyrins and Phthalocyanines**, v. 24, n. 5-7, p. 693-704, 2020.

IC46

Desenvolvimento e validação de biossensores portáteis e de baixo custo à base de anticorpos/antígenos

MAIA, Giovanna; GONÇALVES, Débora; MATERÓN, Elsa María

gimaia99@gmail.com

Este trabalho teve como objetivo desenvolver eletrodos miniaturizados de baixo custo e portáteis para atuar como biossensores, ou seja, detectar um analito de interesse à base de anticorpo e antígeno e o analito, nesse caso, foi o coronavírus SARS-CoV-19. Para a fabricação dos eletrodos, foram utilizados filmes de politereftalato de etileno (PET) e, para permitir medidas de corrente, utilizou-se tinta condutora à base de carbono. Para marcação do eletrodo de referência, utilizou-se tinta de Ag/AgCl. Cada eletrodo foi cortado e colocado uma fina camada de esmalte para a demarcação de uso. Foi utilizada a técnica drop casting (1) para a modificação da superfície a partir do uso de um eletrodo de trabalho de polieterimida (PEI), que foi modificado também com nanopartículas de Au (Au-NPs) para aumentar a bioafinidade do eletrodo via anticorpo/antígeno. Para a conjugação covalente de anticorpos, foi utilizado EDC (1-etil-3-(3-dimetilaminopropil)-carbodiimida), que atua no posicionamento de proteínas na superfície das NPs no eletrodo. (2) Foi utilizado também NHS (N-hidroxissuccinimida) a fim de promover a estabilidade com o intermediário formado com o EDC. O anticorpo foi adicionado, e para evitar a ligação inespecífica de anticorpos aos conjugados, utilizou-se uma solução de albumina de soro bovino (BSA), como método de conjugação covalente para a ligação de moléculas biológicas à superfície de NPs. As medidas eletroquímicas foram realizadas utilizando um potenciostato/galvanostato Autolab PGSTAT204 junto ao software NOVA 2.1.4. As medidas foram feitas utilizando-se duas soluções de tampão (PBS pH 7,2) e uma sonda redox ferri-ferro (ferricianeto e ferrocianeto de potássio). Para a análise da variação do potencial vs. Corrente (voltamogramas cíclicos), utilizou-se a solução tampão e, para as medidas de impedância, a sonda redox. Foi feito também o estudo dessa técnica para analisar a resistividade do eletrodo com as modificações. Como resultados principais foram obtidas as detecções do antígeno em diferentes concentrações (3) por voltametria de onda quadrada após a variação da concentração de antígeno e mudando os parâmetros necessários.

Palavras-chave: Sensores. Eletrodos digitalizados. Diagnósticos.

Agência de fomento: CNPq (160663/2021-0)

Referências:

- 1 KUMAR, A. K. S. *et al.* A mini-review: how reliable is the drop casting technique? **Electrochemistry Communications**, v. 121, p. 106867-1-106867-10, Dec. 2020. DOI: 10.1016/j.elecom.2020.106867.
- 2 TALBI, M. T. *et al.* Graphite screen printed electrodes functionalized with AuNPs-PEI for nitrite detection. *In* : INTERNATIONAL MULTI-CONFERENCE ON SYSTEMS, SIGNALS & DEVICES, 16., 2019, Istanbul. **Proceedings [...]**. Piscataway: Institute of Electrical and Electronic Engineers - IEEE, 2019. p. 607-610.

3 SARI, A. K. *et al.* The optimization of an electrochemical aptasensor to detect RBD protein S SARS-CoV-2 as a biomarker of COVID-19 using screen-printed carbon electrode/AuNP. **Journal of Electrochemical Science and Engineering**, v. 12, n. 1, p. 219-235, 2022.

IC47

Produção de guias de ondas volumétricas com pulsos de femtossegundos

TRANZIL, Vinícios Tadeu Rodrigues; MENDONÇA, Cleber Renato

vinicios.tranzil@usp.br

O guiamento da luz é condição necessária para o desenvolvimento de novas tecnologias fotônicas, principalmente em dispositivos de óptica integrada. O desenvolvimento de tais guias em materiais vítreos apresenta vantagens principalmente relativas a tridimensionalidade e robustez mecânica. (1) Vidros de Pirofosfato de metais pesados possuem uma larga janela de transparência e exibem efeitos ópticos não lineares de natureza ultrarrápida. Dessa forma, é possível produzir estruturas de ordem micrométrica nesse tipo de material com o uso de um laser suficientemente intenso. Diante disso, os objetivos do projeto de iniciação científica foram primeiramente avaliar como amostras de vidros de Pirofosfato de Chumbo aos quais foram adicionadas diferentes quantidades de Óxido de Níbio $\text{Pb}_2\text{P}_2\text{O}_7 - \text{Nb}_2\text{O}_5$ respondem a pulsos ultracurtos do ponto de vista de microestruturação, bem como produzir as guias de onda neste material. Para tanto, foram feitas as espectroscopias em UV-Vis das amostras a partir das quais foi possível estimar as energias de bandgap de cada uma delas. Além disso, através de método de dano zero proposto por Liu (2), que diz que existe uma dependência entre a energia por pulso e a espessura das linhas causadas por pulsos laser com perfil de intensidade Gaussiano que é dada por $r_{th}^2 = \frac{w_0^2}{2} \ln \frac{E_p}{E_{th}}$. Fazendo linhas usando diferentes valores de energia por pulso, é possível obter a energia de limiar de dano das amostras que, a partir de $F_{th} = \frac{2E_{th}}{\pi w_0^2}$ se chega na Fluência de limiar de dano. Repetindo o processo para diferentes números de pulso, o modelo $F_{th,N} = (F_{th,1} - F_{th,\infty})e^{-k(N-1)} + F_{th,\infty}$ fornece as fluências de limiar de dano para 1 e para infinitos pulsos, bem como, o parâmetro de incubação (k) que é tão maior quanto mais difícil é saturar o material. (3) Os resultados iniciais mostram uma grande variação no valor do parâmetro de incubação (k) para as amostras com mais Nb2O5.

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

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1. MANZANI, D. *et al*. Highly nonlinear $\text{Pb}_2\text{P}_2\text{O}_7\text{-Nb}_2\text{O}_5$ glasses for optical fiber production. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 443, p. 82–90, July 2016.
2. LIU, J. M. Simple technique for measurements of pulsed gaussian-beam spot sizes. **Optics Letters**, v. 7, n. 5, p. 196, 1982.
3. NOLASCO, Lucas Konaka. **Investigation of the fs-micromachining process in GaN and diamond**. 2021. Dissertação (Mestrado em Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais) - Escola de Engenharia São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021. DOI:10.11606/D.18.2021.

IC48

Remoção de ruído em sinais e imagens por ressonância magnética utilizando Transformada Wavelet

OLIVEIRA, Caio de Jesus de; PAIVA, Fernando Fernandes

caio.dejesusoliveira@usp.br

As técnicas de ressonância magnética (RM) nos permitem obter sinais e imagens de extrema utilidade para diversas aplicações biológicas e clínicas. (1) Porém, durante o processo de geração, há um fator que degrada a informação: o ruído. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é buscar as melhores configurações para a filtragem de ruído com transformada wavelet em sinais e imagens de RM. Foi feito um estudo sobre a transformada discreta wavelet (DWT) em até três dimensões espaciais para aplicar os métodos presentes na literatura para a filtragem de dados simulados de RM. Nos aprofundamos, mais especificamente, em 1D simulando um sinal de ruído controlado na linguagem de programação Python e aplicando a filtragem com DWT a partir do thresholding dos coeficientes de detalhe (2) como descrito pela Figura 1. Ao longo do trabalho, avaliamos a influência do modo de thresholding, dos níveis de decomposição e da escolha da wavelet mãe na filtragem. Para isso usamos métricas de qualidade e análises de artefatos e regiões de resíduo nulo no domínio da frequência. Observamos que a filtragem wavelet de sinais de RM cria artefatos no domínio da frequência que se propagam no tempo. Portanto, não devemos qualificar a filtragem somente pelas métricas de qualidade, mas também por sua influência no espaço de Fourier. Estes artefatos podem ser afetados pelo ajuste do número de níveis de decomposição e pelo suporte da wavelet mãe, levando sempre em conta a correlação entre o suporte e o número máximo de níveis de decomposição. Assim, o número de níveis favorece a filtragem em maiores partes do espectro, mas é preciso equilibrá-lo com um suporte alto, o que diminui a amplitude dos artefatos. Vimos que famílias com resposta linear (Coiflet e Symlet) são favoráveis a respostas em fase não linear (Daubechies) e o modo de hard thresholding é preferível por não diminuir a amplitude do sinal. Por fim, percebemos que realizar um deslocamento de frequência prévio à filtragem resulta em pequenas distorções e não possui artefatos no domínio espectral. Vimos na literatura como a DWT pode ser usada para filtragem de sinais, imagens e volumes de RM. Nos estudos de sinais simulados, vimos como a escolha do modo de thresholding, do número de níveis da transformada e da wavelet mãe influenciam a restauração do sinal. Além disso, percebemos que realizar um deslocamento de frequência prévio traz bons resultados. Em estudos futuros, deve-se aplicar o processo descrito neste trabalho para outras dimensões espaciais.

Palavras-chave: Wavelet. Ruído. Ressonância magnética.

Agência de fomento: CNPq (2021-844)

Referências:

- 1 BROWN, R. W. *et al.* **Magnetic resonance imaging: physical principles and sequence design.** 2nd ed. Hoboken: Wiley, 2014. DOI: 10.1002/9781118633953.
- 2 MALLAT, S. **A wavelet tour of signal processing: the sparse way.** Berlin: Elsevier, 2009. v. 1.

IC49

Remoção de ruído em sinais e imagens por ressonância magnética

HENRIQUE, Rafael; PAIVA, Fernando Fernandes; SOLCIA, Gustavo

rafaelhenri@usp.br

Imagens por ressonância magnética (IRM) são amplamente utilizadas no ramo científico, seja para análises médicas ou físicas. Porém quando adquirimos imagens há ruído nelas, que atrapalha a análise das mesmas. Portanto, precisamos estudar métodos como o filtro *Non-Local Means* (NLM) (1) para lidar com o ruído. O objetivo deste trabalho é comparar a eficiência da filtragem do NLM com distribuição rician (2) ao invés de um NLM com distribuição gaussiana em imagens por ressonância magnética, além de testar a paralelização do algoritmo. Fazemos uso da base de dados *BrainWeb* com imagens simuladas em T1. Segmentamos o tecido cerebral, eliminando o fundo através do método de OTSU e removendo a calota do cérebro através do *Brain Extraction Tool* (BET). Após esse tratamento, começamos a adicionar ruído riciano nas imagens de 2% até 20% e comparamos o algoritmo NLM com distribuição gaussiana e rician. Utilizamos as seguintes métricas: CoC, SSIM, SNR e EPI. (3) Além disso, realizamos a paralelização do NLM utilizando até 12 threads e levantamos uma curva de *speedup* para analisar a economia no tempo de processamento. As mesmas métricas de qualidade são utilizadas nas imagens resultantes para garantir a eficiência da filtragem. Verificamos que não há vantagem em alterar a distribuição rician pela distribuição gaussiana. Além de aumentar a complexidade no código, as métricas de qualidade mostraram que na maioria dos casos não há uma diferença significativa entre as imagens. Por outro lado, o novo método de abordagem do NLM em conjunto com sua paralelização mostrou-se efetivo. Quando utilizamos o NLM sequencial da biblioteca *scikit-image* temos um tempo médio de filtragem em 6,04 segundos, já quando fazemos uso do NLM paralelizado com 7 threads temos um tempo de 1,6 segundos. As métricas de qualidade mostram que não houve diferença entre o código sequencial e o paralelo. Portanto concluímos que o maior benefício está em paralelizar o NLM invés de mudar a distribuição de ruído. A vantagem de se diminuir o tempo é devido a grande quantidade de dados em um *dataset*, permitindo processá-los com maior rapidez.

Palavras-chave: Imagens por ressonância magnética. Ruído. Non-local means.

Agência de fomento: PUB-USP (1734)

Referências:

1 BUADES, A.; COLL, B.; MOREL, J.-M. A non-local algorithm for image denoising. *In* : IEEE COMPUTER SOCIETY CONFERENCE ON COMPUTER VISION AND PATTERN RECOGNITION, San Diego, CA, 2005. **Proceedings [...]**. Piscataway: Institute of Electrical and Electronic Engineers - IEEE, 2005. DOI: 10.1109/CVPR.2005.38.

2 WIEST-DAESSLÉ, N. *et al.* Rician noise removal by non-local means filtering for low signal-to-noise ratio MRI: applications to DT-MRI. **Lecture Notes in Computer Science**, v. 5242, p. 171-179,

2008. DOI: 10.1007/978-3-540-85990-1_21.

3 COUPÉ, P. *et al.* Adaptive multiresolution non-local means filter for three-dimensional magnetic resonance image denoising. **IET Image Processing**, v. 6, n. 5, p. 558-568, 2012.

IC50

Sub-radiância em nuvens de átomos frios

AZZAR, Paola Rebeca Storino; BACHELARD, Romain Pierre Marcel

paola.azzar@gmail.com

Nuvens de átomos frios espalham a luz de maneira “cooperativa”: a luz incidente induz dipolos atômicos, o que gera interação dipolo-dipolo entre as partículas. (1) Essa interação é a origem da famosa super-radiância em sistemas de dois níveis, um fenômeno que foi depois observado em vários sistemas, além da física atômica. Hoje o fenômeno voltou a chamar atenção da comunidade pela possibilidade de usar o efeito, para controlar a emissão, como por exemplo no laser super-radiante. Porém, existe hoje um debate sobre a natureza da sub-radiância em grandes nuvens desordenadas: enquanto ela pode ser entendida usando uma abordagem de espalhamento coerente de luz (modelo de dipolos acoplados), o “armazenamento de radiação” é um fenômeno incoerente que também pode explicar os grandes tempos de vida da radiação relatados em alguns experimentos. (2) O objetivo do presente projeto é propor um teste que permite diferenciar processo coerente e incoerente de radiação com grande tempo de vida. A proposta é introduzir uma mudança de fases aleatórias dos dipolos durante a dinâmica de radiação, o que irá afetar os processos coerentes (i.e., para quais a relação entre as fases dos dipolos é importante), mas não os processos incoerentes (pois modelos de marcha aleatória de fótons, que possuem intensidade, mas não fase, não serão afetados). Usando um modelo que leva em conta tanto os processos coerentes quanto incoerentes, implementamos essa mudança de fase através de um campo magnético externo sintonizável. Observamos que a dinâmica de radiação da luz é alterada, o que sugere que a energia no sistema é redistribuída entre os modos super- e sub-radiantes. Essa observação permite descartar o armazenamento de radiação, pois ele não é sensível às fases, e assim não é alterado pelas mudanças de fase. Enquanto temos os primeiros índices de um teste que permite diferenciar processos coerentes e incoerentes, no futuro pretendemos caracterizar em mais detalhe a redistribuição de energia entre os modos coletivos do sistema, realizada com a manipulação das fases.

Palavras-chave: Átomos frios. Espalhamento. Efeitos coletivos.

Agência de fomento: CNPq (139060/2021-9)

Referências:

- 1 LEHMBERG, R. H. Radiation from an N-atom system: general formalism. **Physical Review A**, v. 2, n. 3, p. 883–888. Sept. 1970.
- 2 COTTIER, F. A. J. **Light-atom interaction:** mean-field approach and intensity fluctuations. 2018. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo. São Paulo, 2018.

IC51

O método de Monte Carlo variacional aplicado a núcleos leves

TONHON, Rafael; MADEIRA, Lucas

tonhonr@usp.br

Estudamos sistemas nucleares, com ênfase em núcleos leves ($A \leq 4$). Analisamos o único estado ligado de dois núcleons, o dêuteron. Em um primeiro momento, utilizamos o modelo do poço esférico para modelar a interação, fazendo-se uso de resultados analíticos e métodos numéricos para reproduzir a energia ($E = -2,22$ MeV) e o raio quadrático médio ($r_{\text{rms}} = 2,10$ fm) experimentais do dêuteron. Mostramos que esse modelo simples é capaz de explicar a fraca ligação do dêuteron e seu tamanho anormal em relação aos demais núcleos. Em seguida, adotamos um potencial mais realístico que leva em conta a existência dos orbitais s e d na função de onda do dêuteron e seu momento de quadrupolo. Para isso consideramos um potencial que leva em consideração o spin e isospin dos núcleons. (1) Construímos a função de onda utilizando essa interação e, por fim, fomos capazes de formular uma função de onda teste adequada para a aplicação do método variacional de Monte Carlo. Finalmente, apresentamos nossos trabalhos futuros e possíveis direções.

Palavras-chave: Monte Carlo. Núcleos leves 3. Física nuclear.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

1 MADEIRA, Lucas. **Quantum Monte Carlo studies of strongly interacting Fermionic systems**. 153p.2018. Dissertation (Doctor of Philosophy) Arizona State University, Arizona, 2018.

IC52

Estudo de rochas reservatório por Ressonância Magnética Nuclear em condições de perfilagem de poços de petróleo

SILVA, Edgar Salgado; MARASSI, Agide Gimenez; BONAGAMBA, Tito

edgars.silva@usp.br

A técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) se mostra muito relevante na área da ciência e engenharia de petróleo, principalmente na avaliação da produtividade de poços de petróleo ao determinar parâmetros como porosidade, distribuição de tamanho de poros, permeabilidade, fluido livre e fluido irreduzível. Em geral, a aquisição de dados de RMN pode ser feita via um procedimento chamado *Logging-While-Drilling* (LWD), cuja medida é feita durante o processo de perfuração do poço, o que resulta em uma série de complicações ao sinal de RMN observado. A presente pesquisa simula as condições de LWD, com o movimento da amostra limitado a um movimento harmônico simples. O sistema mecânico desenvolvido foi projetado de tal forma que a amostra estudada (rocha arenítica Berea saturada em água) oscila sob condições controladas de frequência e amplitude limitado à região do *sweet spot* (1), que se trata de uma região sensível para a medida de RMN, na presença de um gradiente de campo magnético constante.(2) Os dados de RMN foram coletados através da sequência de pulsos denominada *Carr-Purcell-Meiboom-Gill* (CPMG) (3), que posteriormente foi analisada com o auxílio do software *MatLab* e do processamento de sinal via Transformada Inversa de Laplace (ILT), de onde pode ser extraída a distribuição dos tempos de relaxação transversal (T_2) que compõem o sinal observado. Através dessa abordagem, pode-se avaliar o impacto, mesmo de um movimento bastante simples, nas medidas de RMN, e como esses efeitos podem acarretar em resultados subestimados para valores de porosidade de uma rocha referência e outras propriedades petrofísicas que determinam a viabilidade econômica da exploração de um poço de petróleo.

Palavras-chave: RMN. Magnetos unilaterais. Porosidade.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 OLIVEIRA-SILVA, R. *et al.* A benchtop single-sided magnet with NMR well-logging tool specifications: examples of application. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 322, p. 106871-1-106871-8, 2021. DOI: /10.1016/j.jmr.2020.106871.
- 2 CASANOVA, F.; PERLO, J.; BLÜMICH, B. **Single-sided NMR**, Heidelberg: Springer, 2011.
- 3 MEIBOOM, S.; GILL, D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times. **Review of Scientific Instruments**, v. 29, n. 8, p. 688-691, 1958.

IC53

Desenvolvimento da parte mecânica da cavidade laser Ti:Safira Femtossegundo

GIROTO, Vinicius; YASUOKA, Fatima Maria Mitsue; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de

viniciusgiroto@usp.br

O laser Ti:Safira Femtossegundo é um laser de estado sólido pulsado, cuja cavidade do tipo bow-tie, que é constituído de um cristal de safira (Al_2O_3) dopada com íons de titânio (Ti^{3+}) (1), dois espelhos curvos chirped e um espelho plano e um espelho plano de saída. A operacionalidade do laser de pulsos ultracurtos exige a completa estabilidade da cavidade óptica, através do alinhamento preciso de forma a provocar o aumento do número de modos acoplados igualmente espaçados de acordo com a taxa de repetição, atingindo o regime de modos travados (mode-locking). Foi necessário realizar a revisão óptica e otimização da cavidade com o objetivo de definir as condições de estabilidade para geração de pulsos ultracurtos. Este trabalho está relacionado ao desenvolvimento de toda a parte mecânica da referida cavidade. Utilizando o software mecânico SolidWorks®, toda a parte de fixação dos suportes dos componentes ópticos e o suporte do cristal sobre uma base de alumínio foram projetados para se obter a condição ideal para atingir o regime de modos travados.

Palavras-chave: Laser. Mecânica. Óptica.

Agência de fomento: CNPq (2021-3432)

Referências:

1 MOULTON, P. F. Spectroscopic and laser characteristics of $\text{Ti}:\text{Al}_2\text{O}_3$. **Journal of Optical Society of American B**, v. 3, n. 1, p. 125–133, Jan. 1986.

IC54

Processamento de sinais para o estudo de meios porosos por Ressonância Magnética Nuclear em condições de perfilagem de poços de petróleo

KUL, João Octavio; BONAGAMBA, Tito; FERREIRA, Arthur Gustavo de Araujo

joaooctaviokul02@usp.br

Em Ressonância Magnética Nuclear (RMN), ao aplicarmos em uma amostra a sequência de pulsos CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill) (1) na presença de um campo magnético externo, observamos o processo de relaxação transversal descrito pelas equações de Bloch. (2) De acordo com essas equações, a magnetização transversal da amostra decai exponencialmente pela relação $M_{xy}(t) = M_0 e^{-t/T_2}$, onde T_2 é o tempo de relaxação característico do meio. No estudo de meios porosos, é de grande importância determinar o(s) valor(es) de T_2 associado(s) à amostra. Esse parâmetro fornece informações sobre as suas características físicas, como a relaxatividade superficial e a porosidade. Para determiná-lo, consideramos o decaimento exponencial medido como sendo uma Transformada de Laplace discretizada, e, em geral, construímos um sistema linear que nos fornece como solução a distribuição dos valores de T_2 do meio poroso, ou seja, a Transformada Inversa de Laplace (ILT). (3) Neste trabalho, inicialmente, foi feita a seguinte simulação numérica: para a mesma distribuição dos valores de T_2 de um meio poroso hipotético, foram construídos decaimentos multi-exponenciais (ou seja, com múltiplos valores de T_2) variando o tempo ao eco (tempo entre duas aquisições de sinal de RMN). Como efeito dessa variação, foi verificado que o resultado da ILT passa a divergir da distribuição original a partir de certos valores de tempo ao eco. Portanto, em um experimento de RMN, deve-se usar uma janela temporal de aquisição que não seja grande o suficiente para perdermos informação sobre o meio poroso. Na coleta de dados experimentais, foram utilizadas amostras de água, gel e rochas saturadas com água destilada, que oscilam em torno do *sweet spot* do magneto unilateral, onde há um gradiente de campo intenso e aproximadamente constante. Este cenário configura as condições encontradas durante a utilização da RMN na perfilagem de poços de petróleo, com destaque para medidas realizadas durante a perfuração do poço (*logging-while-drilling* - LWD). Os resultados foram controlados por frequência e amplitude de oscilação, para analisar o impacto de cada um desses parâmetros na medida. Nesse caso, verificamos que ao mover a amostra em torno da posição ótima do magneto, passamos a ter uma perda mais rápida de sinal nos primeiros ciclos de oscilação. Além disso, a distribuição de T_2 da amostra muda em relação à original conforme a amplitude de oscilação aumenta, pois porções cada vez maiores da amostra não são mais excitadas pelos pulsos de radiofrequência, dando origem ao efeito da seletividade.

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear. Processamento de sinais. Meios porosos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 MEIBOOM, S.; GILL, D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times. **Review**

of **Scientific Instruments**, v. 29, n. 8, p. 688-691, 1958.

2 CASANOVA, F.; PERLO, J.; BLÜMICH, B.(ed.) **Single-sided NMR**. Berlin: Springer, 2010.

3 SOUZA, A. **Estudo de propriedades petrofísicas de rochas sedimentares por Ressonância Magnética Nuclear**.236p.2012. Tese (Doutor em Ciência e Engenharia dos Materiais) - Instituto de Física de São Carlos , Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

IC55

Avaliação do FAR-UVC 222 nm na descontaminação e aumento do tempo de prateleira de frutas.

DELFINO, Mariana; ALVES, Fernanda; CORREA, Thaila; PRATAVIEIRA, Sebastião

mmayumi.yamashiro@gmail.com

Atualmente, as metodologias para descontaminação de alimentos consistem em processos térmicos, como a pasteurização, e lavagens químicas; contudo ambos são prejudiciais aos frutos, podendo alterar suas propriedades físico-químicas. Uma nova alternativa é a utilização da radiação ultravioleta-C em 222 nm, a qual é emitida por lâmpadas de excímero de cloreto de criptônio, que tem ação nas ligações peptídicas de biomoléculas da membrana e do citosol, eliminando eficientemente os microrganismos, sem causar efeitos cancerígenos na pele exposta de mamíferos devido a sua limitada penetração superficial (1); ao mesmo tempo que auxilia na maximização do tempo de prateleira ao inibir a senescência e a produção de enzimas degradantes. Dessa forma, o objetivo do presente estudo é avaliar a eficácia do ultravioleta-C em 222 nm na descontaminação de alimentos e verificar se há um prolongamento do tempo de prateleira dos mesmos. Os ensaios foram realizados utilizando a irradiação em superfícies de tomates, em uma região delimitada (2 cm x 2 cm) e contaminada com *E. coli* a 10^6 UFC/mL, em grupos, por diferentes tempos para receberem as doses de 0, 0,9, 1,7, 3,4, 7 e 27,5 mJ/cm². Foram realizadas avaliações microbiológicas a partir da contagem de colônias viáveis recuperadas do alimento após o tratamento.(2) Além disso, durante os 14 dias de armazenamento em estufa a temperatura ambiente (25°C) para analisar a progressão do tempo de prateleira, foram aferidos diariamente o peso, o pH e os parâmetro colorimétricos, medidos com auxílio de um colorímetro que retornava valores do sistema CIE Lab, sendo representativos para este estudo o parâmetro L, relacionado com a luminosidade da superfície, e o parâmetro a, relacionado com a intensidade da cor vermelha. Como resultados, pode-se observar que a descontaminação foi eficiente, havendo redução total de 5,4 log₁₀ UFC/mL na dose de 3,4 mJ/cm². A perda de peso diária não demonstrou grandes divergências em decorrência dos ciclos de irradiação: a maior perda de peso em alguns grupos tratados coincide com a perda de peso de seu controle, indicando maior influência da safra e não do tratamento. Da mesma forma, todas as amostras, tratadas ou não, apresentaram o pH próximo de 4,5 esperado de acordo com a literatura. O parâmetro L deveria sofrer uma redução gradativa para indicar o amadurecimento dos tomates, ao passo que o parâmetro a deveria aumentar como representativo da intensificação da cor vermelha. No entanto, em ambos, tal alteração foi extremamente sutil. Assim, a partir dos resultados obtidos, foi possível concluir que apesar da eficácia na descontaminação da superfície dos tomates, não foi identificado um significativo prolongamento no tempo de prateleira, fato que também infere a não existência de danos ou comprometimento físico aos frutos, de modo que as diferentes doses não foram prejudiciais ao desenvolvimento dos tomates. Em consequente, é possível visualizar como perspectivas futuras, a aplicação do ultravioleta em 222 nm na descontaminação de alimentos em ambientes como supermercados e sacolões, sendo um processo eficiente para eliminação de microrganismos, que não altera a qualidade dos frutos e não causa danos a pele exposta de mamíferos.

Palavras-chave: Ultravioleta. Microrganismos. Inativação.

Agência de fomento: FAPESP (2021/08364-8)

Referências:

1 WELCH, D. *et al.* No evidence of induced skin cancer or other skin abnormalities after long term (66 week) chronic exposure to 222-nm Far-UVC radiation. **Photochemistry and Photobiology**, v. 25, n. 10, p.1111, 2022. DOI: 10.1111/php.13656.

2 CORREA, T. Q. *et al.* Effects of ultraviolet light and curcumin-mediated photodynamic inactivation on microbiological food safety: a study in meat and fruit. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 30, p. 101678, 2020. DOI: 10.1016/j.pdpdt.2020.101678.

IC56

Desenvolvimento e aplicação de nanofármacos a partir do reposicionamento de agentes terapêuticos contra a Covid-19

SILVA, Jaqueline da; ZUCOLOTTI, Valtencir; BERNARDI, Juliana Cancino

jaque2000@usp.br

A pandemia da Covid-19 se espalhou rapidamente por todo o mundo, causando milhares de infecções e gerando altíssimos gastos para os sistemas de saúde ao redor do mundo. Solucionar os problemas no tratamento e detecção contra a Covid-19 requer novas tecnologias com maior eficácia e mais segurança ao paciente. Nesse contexto, a nanotecnologia é uma importante aliada, pois a vantagem desses sistemas está principalmente na sua capacidade de permeabilidade no organismo, além de promover uma atuação do fármaco de maneira concentrada no sistema alvo, isso é, nas células acometidas pelo vírus. (1) Assim, esse projeto de iniciação científica teve como objetivo atuar na síntese e caracterização de nanopartículas metálicas e nanopartículas poliméricas como possíveis veículos terapêuticos para tratamento associado contra Covid-19. Foram sintetizadas nanopartículas de ouro nos formatos de esfera (AuNP) e bastões (AuNR). As nanopartículas metálicas foram posteriormente incluídas em nanocápsulas poliméricas de ácido poli-láctico (PLGA), um dos sistemas mais utilizados para entrega de fármacos. Todas as nanopartículas e nanocápsulas foram caracterizadas por técnicas espectroscópicas e microscópicas. Os resultados mostraram que as nanopartículas de ouro e platina possuem distribuição homogênea, sendo seus tamanhos e potencial zeta de 25 nm e -44 mV para AuNP. Os AuNRs apresentaram tamanho transversal de c.a. 5 nm e o longitudinal de 57 nm, com potencial zeta de $+49$ mV devido seu estabilizante. A associação dessas nanopartículas metálicas com sistemas poliméricos do tipo PLGA resultaram em sistemas heterogêneos e com baixa quantidade de nanopartículas metálicas incorporadas. (2-3) Novos estudos estão sendo realizados para a aplicação desses sistemas como potenciais antivirais para posterior associação com fármacos para aumentarmos significativamente a eficácia no tratamento contra a COVID-19 pela sinergia dos sistemas combinados.

Palavras-chave: Nanopartículas metálicas. Nanocápsulas. Teranósticos. Covid-19.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 CARDOSO, V.M.O. *et al* Is nanotechnology helping in the fight against COVID-19? **Frontiers Nanotechnology**, v.2,n.58815, Nov. 2020.
- 2 MILLER, A. *et al*. A super-potent tetramerized ACE2 protein displays enhanced neutralization of SARSCoV-2 virus infection. **Scientific Reports** v.11,n.10617,p. 1–13,2021.
- 3 MIRANDA, R.R. *et.al* Modulating fingolimod (FTY720) anti-SARS-CoV-2 activity using a PLGA-based drug delivery system. **ACS Applied Biomaterials** ,v.5,n.7,p.3371-3383,2022.

IC57

Otimização da terapia Sonofotodinâmica mediada pela Curcumina contra biofilme de *Pseudomonas aeruginosa*

CARVALHO, Iago; ALVES, Fernanda; BAGNATO, Vanderlei Salvador; PRATAVIEIRA, Sebastião

iagocarvalho0167@usp.br

Bactérias são responsáveis pela maioria das doenças infecciosas, além de ser uma das maiores causas de morte no século passado. Felizmente soluções químicas como os antibióticos foram desenvolvidas e controlaram de forma eficiente o surgimento de novos casos, bem como as mortes por tais agentes infecciosos. Porém, rapidamente perfis de resistência surgiram nas mais diferentes cepas ao redor do mundo, trazendo à tona novamente o perigo que pode ser viver em um mundo sem o controle sobre as bactérias. Tratamentos alternativos surgem, como é o caso da terapia fotodinâmica (PDT), sonodinâmica (SDT) (1) e sonofotodinâmica (SPDT). (2-3) O presente trabalho busca caracterizar diferentes arranjos experimentais, bem como otimizar os parâmetros para tais tratamentos, que é de extrema importância para o avanço dessas tecnologias. Dessa forma, os resultados demonstram que ensaios *in vitro* com biofilme de *Pseudomonas aeruginosa* com SPDT é capaz de erradicar pela totalidade o biofilme formado, bem como a mudança da forma de aplicação do ultrassom influencia a eficácia do tratamento. Arranjos distintos mostram diferentes características, mesmo assim mantêm resultados como a erradicação da população de *S. aureus* em solução apenas com SDT. Resultados mostraram otimismo quanto ao avanço dos testes em células microbiológicas, proporcionando assim uma promessa de que com tempo e mais trabalhos na área, seja possível consolidar tais tratamentos como métodos alternativos no tratamento de doenças infecciosas na clínica.

Palavras-chave: Sonofotodinâmica. Bactérias. Biofilme.

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

Referências:

- 1 ROSENTHAL; I.; SOSTARIC, J. Z.; RIEZ, P. Sonodynamic therapy: a review of the synergistic effects of drugs and ultrasound. **Ultrasonics Sonochemistry** v. 11, p.349–363, 2004.
- 2 ALVES, F.; AYALA, E. T. P.; PRATAVIEIRA, S. Sonophotodynamic Inactivation: the power of light and ultrasound in the battle against microorganisms. **Journal Photochemistry and Photobiology**, v.7, n. 10, p.100039, 2021.
- 3 ALVES, F. *et al.* Strategies to improve the antimicrobial efficacy of photodynamic, sonodynamic, and sonophotodynamic therapies. **Lasers Surgery Medicine**, v. 53, p.1113–1121, 2021.

IC58

Avaliação das propriedades fotoantimicrobianas de revestimentos fotossensíveis: potencial aplicação na descontaminação de produtos cárneos

LOPES, Letícia Keller Bergamo Cunha; DIAS, Lucas Danilo

leticiakellerb@gmail.com

O consumo de alimentos contaminados é um sério problema de saúde pública, gera o desperdício de um terço dos alimentos produzidos em todo mundo e pode resultar em diversas doenças. Os tipos de alimentos normalmente relacionados a doenças e hospitalizações são carnes, laticínios, frutas, vegetais, frutos do mar, grãos e nozes. (1) Neste contexto, a terapia fotodinâmica antimicrobiana (PDI) é considerada uma alternativa eficiente e de baixo custo no controle de microrganismos patogênicos. (2) Considerando sua ampla aplicação e eficiência, a PDI pode ser aplicada na indústria alimentícia, buscando aumentar a vida útil em prateleira de diversos tipos de alimentos e diminuir a contaminação destes. Por meio do presente trabalho foram aplicados filmes de curcumina e extrato de romã à base de quitosana e gelatina como revestimento em produtos cárneos (frango e carne vermelha). Os filmes de curcumina e extrato de romã foram preparados em diferentes concentrações, obtendo assim seis filmes (CHGC0.5 - 0.5 mg curcumina g⁻¹ de solução; CHGC1 - 1 mg curcumina g⁻¹ de solução; CHGC2 - 2 mg curcumina g⁻¹ de solução; CHGE1 - 1 mg extrato de casca de romã g⁻¹ de solução; CHGE2 - 2 mg extrato de casca de romã g⁻¹ de solução; CHGE5 - 5 mg extrato de casca de romã g⁻¹ de solução). Os filmes foram submetidos à análise de photobleaching, que consiste na perda de absorção ou fluorescência do fotossensibilizador após iluminação. A fotodegradação consiste no processo de decomposição de uma molécula induzida por luz, e é dependente do espectro de emissão da molécula estudada. A dissipação de energia pode se dar por fluorescência, fotoionização, entre outros processos. (3) Em relação à análise de perda de massa, as amostras de produtos cárneos foram revestidas pelos filmes e divididas em dois grupos, sendo que um foi iluminado um comprimento de luz específico para cada fotossensibilizador (de 450 nm para curcumina e 525 nm para extrato de casca de romã) e outro não, e comparados a um grupo controle, durante um período de 8 dias. Quanto à avaliação da perda de massa, a média da perda de massa nas amostras de frango foi similar nos dois grupos (com e sem luz), com exceção do grupo QGC2 com luz, que apresentou uma perda de massa mais elevada. Já em relação à carne vermelha, as amostras tiveram menor perda de massa quando revestidas pelos filmes em relação ao frango. Dentre os filmes, o de menor concentração de curcumina (QGC1) foi o que gerou a menor perda de massa em comparação a todos os outros grupos estudados e os grupos com maior concentração dos ativos foram os que apresentaram maior perda de massa. Também foram realizadas as análises microbiológicas dos filmes fotossensíveis na fotoinativação de bactérias, sendo que o grupo QGE2 (extrato de romã 2 mg/mL) apresentou a maior fotoinativação (3 log UFC/mL).

Palavras-chave: Descontaminação de produtos cárneos. Revestimentos fotossensíveis. Terapia fotodinâmica antimicrobiana.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 THAKALI, A.; MACRAE, J. D. A review of chemical and microbial contamination in food: What are the threats to a circular food system?. **Environmental Research**, v. 194, p. 110635, 2021.
- 2 COUTO, G. K. *et al.* Perspectives of photodynamic therapy in biotechnology. **Journal of Photochemistry and Photobiology B : biology**, v.213,p. 112051, 2020.
- 3 TRAWIŃSKI, J.; SKIBIŃSKI, R. Studies on photodegradation process of psychotropic drugs: a review. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 24, n. 2, p. 1152-1199, 2017.

IC59

Fabricação de guias de ondas com pulsos de femtossegundos em vidros não lineares

VIEIRA, Eduardo Vinícius Macedo; MENDONÇA, Cleber Renato

eduardov@usp.br

A alta intensidade obtida pelos lasers de femtossegundos é capaz de provocar efeitos que não podem ser explicados pelos modelos clássicos da interação da luz com a matéria. Nesse paradigma de campos eletromagnéticos intensos, fenômenos não lineares imperceptíveis a baixas intensidades se fazem presentes e só podem ser explicados utilizando uma abordagem não linear da interação luz-matéria. (1) Com estes pulsos ultracurtos somos capazes de explorar resultados como a absorção de luz visível em materiais considerados transparentes no sentido usual. Nesse contexto, as mudanças estruturais ficam confinadas ao foco do laser, levando a uma alta resolução na produção de estruturas tanto na superfície como no volume de materiais. Atualmente esta técnica se mostra promissora, sendo possível encontrar na literatura múltiplas aplicações, como a construção de guias de onda micrométricos (2) e o armazenamento de dados (3), que têm aplicações diretas dentro da fotônica, como em circuitos ópticos e dispositivos ativos, por exemplo. Sabendo disso, neste projeto, vidros $(100 - x)\text{Pb}_2\text{P}_2\text{O}_7 - x\text{WO}_3$, que exibem interessantes propriedades ópticas e térmicas, estão sendo estudados e caracterizados segundo as previsões teóricas presentes na literatura quanto ao seu comportamento em condições de fabricação com pulsos ultracurtos. Assim, temos como propósito final a demonstração da possível viabilidade de elaboração de guias de onda e o entendimento das alterações na estrutura do material causadas durante a fabricação.

Palavras-chave: Pulsos ultracurtos. Microfabricação. Guias de onda.

Agência de fomento: FAPESP (2021/09002-2)

Referências:

- 1 GATASS, R. R.; MAZUR, E. Femtosecond laser micromachining in transparent materials. **Nature Photonics**, v.2, p. 219-225, Apr. 2008. DOI: /10.1038/nphoton.2008.47.
- 2 AMS, M. *et al.*, Investigation of ultrafast laser-photonic material interactions: challenges for directly written glass photonics. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 14, n. 5, p. 1370-1381, Sept.-Oct. 2008. DOI: /10.1109/JSTQE.2008.925809.
- 3 GLEZER, E. N. *et al.*, Three-dimensional optical storage inside transparent materials. **Optics Letters**, v. 21, p. 2023-2025, Dec.1996. DOI: /10.1364/OL.21.002023.

IC60

Dispositivos detectores de radiação de alta energia baseados em compósitos vítreos cintiladores

YAMASSHIRO, Akira; JESUS, Vinicius D.; LODI, Thiago A.; MERIZIO, Leonnam G.; BERNARDEZ, Andrea S. S. de Camargo Alvarez

akirayamashiro@usp.br

A detecção da radiação de alta energia permite aplicações em diversas áreas, entre elas: medicina, espectroscopia, células solares, sinalização etc. A sensibilidade típica dos detectores do tipo fotomultiplicadores (PMTs) está na região compreendida entre 300 e 900 nm, ou seja, não são adequados para detecção de fótons de alta energia, como os raios X. Uma forma de contornar esta deficiência, é acoplar esses detectores a materiais capazes de converter radiação de alta energia em uma de menor energia, compreendida na região sensível do detector. Neste contexto, materiais cintiladores são capazes de absorver radiação de alta energia e, emití-la como luz visível. Porém, geralmente estes materiais são obtidos na forma de pó, o que limita seu uso. Para contornar este problema, o pó cintilador pode ser incorporado em matrizes vítreas, resultando em materiais compósitos que possuem maior versatilidade e grande facilidade de manipulação, quando comparado aos monocristais. Neste trabalho é reportado a incorporação do material luminescente composto de $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG – Granada de Ítrio e Alumínio) e $YAlO_3$ (YAP – Perovskita de Ítrio-Alumínio) dopados com 1% de Cério (1), na matriz vítrea de composição $80NaPO_3 - 20Al_2O_3$ (NaPAIO). O material luminescente foi preparado de forma rápida e ambientalmente amigável, utilizando o método do estado sólido assistido por micro-ondas (Microwave-assisted solid-state - MASS) com apenas 45 minutos de síntese fazendo uso de carvão ativado como suscepter, que pode atingir temperaturas acima de $1300^\circ C$. (2) A proporção 80:20 da matriz vítrea foi escolhida com o intuito de contornar a higroscopicidade do vidro fosfato e, conferir maior resistência mecânica ao compósito resultante. (3) O pó cintilador obtido via MASS foi incorporado em proporções entre 1-7% em massa nas matrizes NaPAIO utilizando a técnica de fusão e resfriamento em forno resistivo convencional a $1100^\circ C$. Nesta temperatura e condições, o equilíbrio químico pode ser deslocado, resultando em compósitos vítreos que apresentam uma maior contribuição da banda de emissão referente ao YAP: Ce^{3+} ($\lambda_{em} = 344$ nm) comparada à banda de emissão referente ao YAG: Ce^{3+} ($\lambda_{em} = 535$ nm). Além disso, a banda associada à transição 5d-4f do cério relativo ao YAP apresentou um tempo de vida curto na ordem de 30-40 ns, ideal para aplicação em detectores de resposta rápida. Foram medidos espectros de absorção no infravermelho (FTIR) nas amostras para averiguar os modos de vibração de cada material, assim como de absorção UV-Vis para verificar a transparência do compósito. Foram também feitas medidas de microscopia para observar a dispersão e crescimento das partículas de YAG/YAP: Ce^{3+} , cada análise foi capaz de confirmar a adequação dos compósitos fabricados para o uso em PMTs e, portanto, constatar sua capacidade de contribuir com o desenvolvimento de novas tecnologias.

Palavras-chave: Compósitos vítreos. Cintiladores. Luminescência.

Agência de fomento: FAPESP (2021/12361-4)

Referências:

- 1 MASHLAN, M. *et al.* YAG: Ce and YAP: Ce—suitable fast detectors for transmission Mössbauer spectroscopy. **Hyperfine Interactions**, v. 139, n. 1, p. 673-678, 2002.
- 2 MERÍZIO, L. G. *et al.* Toward an energy-efficient synthesis method to improve persistent luminescence of $\text{Sr}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$: Eu^{2+} , Dy^{3+} materials. **Materialia**, v. 20, p. 101226, Dec. 2021.
- 3 BROW, R. K. Nature of alumina in phosphate glass: I, properties of sodium aluminophosphate glass. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 76, n. 4, p. 913-918, 1993.

IC61

Terapia fotodinâmica antimicrobiana com uma nanoemulsão de porfirina e seu efeito na presença do surfactante pulmonar

TOME, Ana Júlia; KURACHI, Cristina; BUZZÁ, Hilde

anajuliabarbosatome@usp.br

A pneumonia é uma doença caracterizada pela inflamação dos alvéolos e pode ser causada tanto por bactérias, vírus ou fungos. De acordo com dados da World Health Organization, a pneumonia- a qual é uma doença do trato respiratório inferior- encontra- se em terceiro lugar entre as 10 maiores de causas de morte no Brasil e no mundo, atrás apenas de doenças isquêmicas do coração e derrame. (1) Das enfermidades que mais causam mortes em crianças menores de 5 anos, a pneumonia encontra- se em primeiro lugar, e dos patógenos mais incidentes cita- se a *Streptococcus pneumoniae*. O tratamento padrão ouro em casos de pneumonia pneumocócica é realizado com antibióticos. Nesse contexto, é sabido que o crescente caso de microrganismos resistentes impedem o tratamento efetivo do paciente. Dados da UNICEF mostram que em 2021, uma criança morre a cada 39 segundos e dados da WHO apresentam que um terço dos antibióticos utilizados para o tratamento da pneumonia não alcançam o objetivo desejado. Dessa maneira, nota- se a urgência em se determinar um tratamento alternativo para pneumonia. A Terapia Fotodinâmica antimicrobiana (TFDa) entra como um tratamento sem relatos de resistência, e consiste em associar um agente fotossensível (FS) com oxigênio molecular e luz em um determinado comprimento de onda e tem como consequência eliminar microrganismos a partir de danos oxidativos simultâneos em várias estruturas celulares. A molécula fotossensível usada neste projeto é uma nanoemulsão de porfirina produzida na University Health Network (UHN) em Toronto (2), no Canadá. A TFDa foi testada contra dois diferentes microrganismos causadores de pneumonia (*S. pneumoniae* e *S. aureus*). Como visto na literatura, o surfactante pulmonar interfere na atividade fotodinâmica in vitro e in vivo (3), portanto grupos com *S. pneumoniae* em contato com Surfactant também foram investigados. Devido a capacidade de nanoestruturas de conjugação de moléculas em sua estrutura, PEG e EDTA foram anexados ao FS com o intuito de aumentar efetividade da TFDa na presença de Surfactant. As soluções de fotossensibilizador utilizadas foram sempre mantidas isoladas da luz ambiente para que não fossem degradadas. As concentrações testadas para ambos os microrganismos variaram entre as ordens de grandeza de nano e micromolar. Os resultados avaliados a partir da contagem de colônias em placas de ágar- sangue mostraram que a TFDa é uma terapia promissora para a eliminação dos microrganismos testados na presença e na ausência do surfactante pulmonar.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Surfactante. Pneumonia.

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

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **The top 10 causes of death.** Disponível em: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/the-top-10-causes-of-death>. Acesso em: 14.09.22.
- 2 HOU, W. *et al.* A nanoemulsion with a porphyrin shell for cancer theranostics. **Angewandte Chemie**

v.131, p.15116–15120,2019.

3 KASSAB, G. **Pulmonary antimicrobial photodynamic therapy and the role of the lung surfactant**. 112p. 2022. Thesis(Doctorate) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos,2022.

IC62

Nanopartículas luminescentes dopadas com íons lantanídeos para aplicação em sensores químicos e biológicos

VASCONCELOS, Leticia; ARAI, Marylyn Setsuko; BRAMBILLA, Gabriel Vinicius; CAMARGO, Andrea Stuchi de

leticiacvasconcelos@usp.br

Nanopartículas por conversão ascendente de energia (UCNPs) possuem alta luminescência e são capazes de emitir luz com comprimento de onda menor do que o de excitação. UCNPs têm sido usados em um grande número de aplicações, mas é provavelmente no campo de sensoriamento que elas melhor evidenciam seu potencial. Graças à baixa citotoxicidade, alta fotoestabilidade, grandes deslocamentos anti-Stokes, longos tempos de vida e um reduzido ruído de fundo, (1) que aumenta significativamente o limite de detecção (LOD), o campo emergente de sensores baseados em UCNPs está evoluindo rapidamente por meio de diversas abordagens. No campo de sensores para meios biológicos, tem ganhado especial destaque, já que nestes meios a excitação com alta energia pode danificar o material e, as UCNPs, dependendo do lantanídeo na dopagem, podem alcançar janelas de excitação de energia ideal para estas aplicações. Ainda no âmbito de sensores, nanopartículas dopadas com o íon Nd^{3+} podem ser utilizadas como sensores de temperatura. (2-3) No presente trabalho foram sintetizadas e otimizadas UCNPs constituídas de diferentes matrizes e íons dopantes, com alta intensidade de luminescência, e nanopartículas dopadas com Nd^{3+} visando a aplicação destes materiais em outros projetos do grupo para o desenvolvimento e construção de sensores de analitos biológicos e de temperatura.

Palavras-chave: Nanoestruturas. Nanopartículas por conversão ascendente de energia. Sensoriamento químico.

Agência de fomento: CNPq (2021-2662)

Referências:

- 1 ARAI, M. S. ; CAMARGO, A. S. S. Exploring the use of upconversion nanoparticles in chemical and biological sensors: from surface modifications to point-of-care devices. **Nanoscale Advances** v. 3, n.18, p.5135–5165, 2021.
- 2 WILHELM, S. Perspectives for upconverting nanoparticles. **ACS Nano** v.11, n.11, p.10644–10653, 2017.
- 3 FARIA, W. J. G. J. T. **Termometria óptica remota baseada em vidros fluorofosfatos dopados com íons terras raras luminescentes**, 2019. 85p. Dissertação(Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2019.

IC63

Avaliação de técnicas de RMN de ^1H no domínio do tempo para realização de experimentos de crioporometria.

TREBBI, Bruno; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de

brunotrebbi@usp.br

A crioporometria por RMN consiste na aplicação de técnicas de ressonância magnética no domínio do tempo para aferir variações na temperatura de transição de fase, geralmente sólido-líquido, de líquidos conhecidos (líquido de prova), os quais foram embebidos em materiais porosos. O preenchimento dos poros com o líquido de prova é feito via pressão de capilaridade, podendo ser requisitado futuras etapas, como a centrifugação e remoção de ar via ambientes de baixa pressão, com auxílio de bombas de vácuo. (1) Os principais resultados da crioporometria, como a determinação de porosidade, tamanho e morfologia dos poros, são consequências da interação do líquido de prova com a superfície porosa, cuja variação da energia livre de Helmholtz resulta em uma variação na temperatura de fusão, modelada via equação de Gibbs-Thomson clássica, a qual permite, por meio da geometria do poro, relacionar tal variação de temperatura de transição às características citadas do material poroso. A detecção dessa variação pode ser feita por meio de mudanças na intensidade do sinal de RMN do líquido de prova, que é detectado via experimento de eco de spin. (2) Apesar da variação contínua na intensidade do sinal com a temperatura, como por exemplo, devido a Lei de Curie (3), uma transição sólido-líquido implica em uma brusca variação na intensidade do sinal. Logo, em uma amostra em que o líquido está embebido em um material poroso, serão tipicamente observadas duas variações de intensidade como função da temperatura, uma relativa ao líquido confinado e outra, ao líquido livre, assim, em um experimento ideal, espera-se duas variações de intensidade típicas de transição de fase. Enquanto a alta mobilidade aleatória em soluções isotópicas presentes nos líquidos resultam, em média, em uma interação dipolar spin-spin nula, em sólidos isso não é verdade. Portanto, devido a grande intensidade do acoplamento dipolar magnético heterogêneo, o sinal de eco de spin da fase sólida é suprimido e o eco de spin pode ser utilizado como filtro para medir o sinal apenas das partes líquidas citadas. Para tal, além dos rigorosos procedimentos na preparação das amostras, faz-se necessário determinar, por meio do tempo de relaxação T_2 da amostra, a presença de líquido livre, o melhor valor de tempo ao eco, que exclua o sinal de eventuais meta-estados provenientes da refrigeração do líquido de teste e, mais importante, um eficiente controle da temperatura da amostra, uma vez que a precisão das medições dos poros está intimamente ligada a temperatura da amostra durante cada etapa do experimento. Além disso, um pós-tratamento é necessário para levar em conta a variação do sinal com a temperatura, para que, por exemplo, a Lei de Curie seja levada em conta e o sinal seja devidamente ajustado. Além da implementação da técnica padrão de crioporometria por ressonância magnética em baixo campo, o estudo de novas sequências para além de ecos de spin isolados como filtro de sinal líquido-sólido serão investigadas, para formalizar a aplicação da crioporometria com o aparato disponível no instituto.

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear. Materiais nanoporosos. Crioporometria.**Agência de fomento:** FAPESP (2022/03724-9)

Referências:

- 1 MITCHELL, J.B.; WEBER, B. W.; STRANGE, J. H. Nuclear magnetic resonance cryoporometry, **Physics Reports**, v. 461, n. 1, 2008. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.02.001.
- 2 HAHN, E. L. Spin echoes, **Physical Review**, v. 80, n. 4, p.580, 1950. DOI: 10.1103/PhysRev.80.580.
- 3 PETROV, O. V.; FURO, I. NMR cryoporometry: principles, applications and potential **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 54, n. 2., 2009. DOI: 10.1016/j.pnmrs.2008.06.001.

IC64

Estudo da interação da melanina com ultrassom de baixa intensidade

SOUZA, Murilo de Oliveira; AYALA, Erika Toneth Ponce; OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de; PRATAVIEIRA, Sebastião

murilodeoliveira8@usp.br

A melanina é um pigmento natural encontrado na maioria dos organismos, sendo uma poderosa substância absorvente de luz, sendo capaz de dissipar mais de 99,9% da radiação UV absorvida. Por conta dessa propriedade, acredita-se que a melanina seja capaz de proteger as células da pele dos danos da radiação UV, reduzindo o risco de degradação dérmica, e câncer de pele. Em casos em que o efeito fotoprotetor da melanina não é suficiente, podem se desenvolver danos na pele que culminam em câncer. A terapia fotodinâmica (TFD) é uma abordagem bem-sucedida no tratamento de lesões pré-cancerosas e câncer de pele não melanoma, com resultados cosméticos excelentes. No entanto, uma limitação da TFD é a limitada penetração da luz visível no tecido biológico, conseguindo atingir 1 cm de profundidade no corpo de forma não invasiva (sem o uso de fibras óticas). Este fato é devido à presença da melanina, a qual é um agente absorvedor e espalhador da luz, além de apresentar efeito antioxidante. Neste sentido, uma terapia promissora não invasiva que vem se estudando para o tratamento de lesões de pele pigmentadas ou de maior espessura é a terapia sonodinâmica (TSD). (1-2) A TSD se baseia nos efeitos sinérgicos do ultrassom de baixa intensidade e uma droga sonoativa chamada de sonosensibilizador (SS). A TSD usa como fonte excitadora ao ultrassom que, ao contrário da luz, é uma onda mecânica que tem excelente penetração nos tecidos biológicos, o que permite a interação do ultrassom com o SS em camadas mais profundas gerando efeitos sonomecânicos (e.g., geração de forças mecânicas) e sonoquímicos (e.g., geração de ROS) (3), os quais induzem a morte celular. Com o intuito de ajudar na compreensão dos efeitos sonodinâmicos sobre tumores pigmentados durante a TSD, esse projeto tem como objetivo estudar as alterações das propriedades ópticas e produtos químicos liberados pela melanina durante a interação com o ultrassom terapêutico, podendo ao final desta pesquisa, relacionar essas alterações com a mudança da concentração da melanina e dos parâmetros do ultrassom.

Palavras-chave: Melanina. Ultrassom. Oxigênio.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

- 1 ROSENTHAL, I.; SOSTARIC, J. Z.; RIESZ, P. Sonodynamic therapy: a review of the synergistic effects of drugs and ultrasound. **Ultrasonics Sonochemistry**, v. 11, n. 6, p. 349-363, Sept. 2004. DOI 10.1016/j.ultsonch.2004.03.004.
- 2 RENGRENG, L. *et al.* Sonodynamic therapy, a treatment developing from photodynamic therapy. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 19, p. 159-166, Sept. 2017. DOI 10.1016/j.pdpdt.2017.06.003.

3 HIDEIG, E.. Detection of free radicals and reactive oxygen species. **Methods Molecular Biology** v.271,p.249-260, 2004.DOI: 10.1385/1-59259-799-8:249.

IC65

PVT: uma ferramenta de visualização computacional para identificação de Amebas de Vida Livre

ISSA, Matheus; BELLINI, Natália Karla; OLIVEIRA, Douglas Cedrim; THIEMANN, Otavio

matheus.issa@usp.br

Amebas de Vida Livre (AVLs) são microrganismos protistas amplamente encontrados na natureza, grande parte deles vivendo livremente no ambiente e tendo importante papel no ecossistema microbiano. Entretanto, alguns gêneros são, também, parasitas oportunistas facultativos, como é o caso de *Naegleria* spp. e *Acanthamoeba* spp. (1) Tais espécies normalmente causam infecções associadas ao Sistema Nervoso Central (SNC) e sua rápida progressão leva os pacientes a óbito. No Brasil, os estudos desses microrganismos são bastante escassos, inexistindo um mapeamento de sua dispersão por todo o território, tornando-se um risco para a população. (2) Um dos fatores que contribuem para a manutenção dessa situação é a não otimização das análises morfológicas hoje realizadas, visto que elas são embasadas na pesquisa manual em chaves de classificação taxonômica, dificultando o processamento eficiente das amostras pesquisadas. Sendo assim, o presente trabalho visou construir um robusto banco de dados contendo todas as espécies e suas respectivas características morfológicas a partir do guia de classificação Page (1988) e, com isso, elaborar uma ferramenta computacional de visualização denominada Page's Visualization Tool (PVT). (3) Para alcançar esse objetivo, foram organizadas sistematicamente e tabuladas as descrições morfológicas das diferentes amebas presentes no guia para que, uma vez completo o banco de dados, ele pudesse servir como cerne para o desenvolvimento do software, a partir da aplicação das técnicas de visualização multidimensional de coordenadas paralelas. A análise refinada do banco de dados permitiu a constatação de que as informações acerca dos três estágios de vida das AVLs são fundamentais para a efetiva distinção morfológica entre as espécies, sendo as do estágio de trofozoíto as mais gerais e completas, especialmente na ausência de características dos estágios encistado e flagelado ou presença de poucas delas. Os dados relacionados aos cistos são essenciais para a diferenciação de espécies quando há uma plena descrição dos mesmos, ao passo que os associados às formas flageladas se tornam cruciais quando os de cistos não são totalmente suficientes. Em contrapartida, informações complementares que descrevem meios de cultura, dispersão geográfica, estilo de vida e temperatura de crescimento não apresentam alta significância, acrescentando especificações únicas para poucas espécies. As características das espécies que produzem corpo de frutificação, por sua vez, têm sua devida relevância por diferenciar a ordem Acrasida das demais. Em posse dessas informações e do banco de dados, a aplicação das técnicas computacionais para uma análise preliminar permitiu a construção de uma interface interativa para o software PVT, de modo a possibilitar que o usuário insira manual e rapidamente as características observadas por microscopia em suas amostras e consiga obter, no melhor dos casos, a espécie estudada ou pelo menos o gênero a qual ela pertence. Sendo assim, a efetividade do processo permite explorar a potencialidade da ferramenta em aperfeiçoar a metodologia hoje empregada para o estudo das morfologias de AVLs e cria espaço para que informações mais recentes e modernas complementem futuramente esse banco de dados, além de estimular futuras pesquisas no tema.

Palavras-chave: Amebas de vida livre. PVT. Page.

Agência de fomento: FAPESP (2021/04364-3)

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, 2004.
- 2 BELLINI, N. K. *et al.* Isolation of *Naegleria* spp. from a Brazilian water source. **Pathogens**, v. 9, n. 2, p. 90, 2020.
- 3 PAGE, F.C. **A new key to freshwater and soil Gymnamoebae:** with instructions for culture. Pennsylvania: Freshwater Biological Association, 1988.122p.

IC66

Estudo estrutural da CDK9 humana e sua interação com ligantes por técnicas de baixa resolução

OLIVEIRA, Beatriz Lauriano de; CANDURI, Fernanda

beatrizlauriano@usp.br

A proteína cinase dependente de ciclina 9 (CDK9) é uma proteína humana reguladora de fatores de transcrição de diversas proteínas sinalizadoras do ciclo celular, responsáveis pela multiplicação das células. A desregulação da CDK9 está relacionada com a ativação de proto-oncogenes e imortalização das células cancerígenas, por esta razão, a possível inibição da CDK9 é uma via terapêutica de interesse em tratamentos anticâncer. (1) Para estudar a atividade inibitória de ligantes com a CDK9 precisamos garantir que a proteína expressa tenha se enovelado corretamente, a expressão da CDK9 no sistema de expressão bacteriano (*Escherichia coli*) produziu a proteína na forma insolúvel e precisou passar por refolding. (2) A fim de aumentar a quantidade de proteína expressa na forma solúvel, enovelada corretamente, este trabalho propõe expressar a CDK9 fusionada com a proteína parceira de fusão SUMO (3) ao transformar a cepa de propagação *E. coli One Shot Top10* com o vetor pET28a-SUMO-cdk9, utilizando inicialmente as enzimas de restrição *BamHI* e *XhoI*. Entretanto após insucessos na transformação, levantou-se a hipótese de problemas na digestão dupla do vetor e do DNA, por conta disso, novos primers foram adquiridos e substituiu-se o sítio de restrição da *BamHI* pelo sítio da *EcoRI* (com atividade de 100% no tampão utilizado) e aumentou de três para seis os pares de bases adicionais para melhorar a ancoragem das enzimas de restrição. Não ocorrendo transformação com os novos primers, foi realizado um teste de linearização do vetor (digestão individual) com as enzimas de restrição separadas para verificar sua atividade, apesar das duas enzimas conseguirem linearizar o vetor, a *XhoI* está muito mais eficiente do que a *EcoRI*. Com esses resultados estão sendo conduzidos novos ensaios alterando o protocolo da digestão dupla, adicionando a enzima de restrição *XhoI* duas horas depois do início da reação com a *EcoRI*. Espera-se dessa forma, conseguir o DNA recombinante pET28a-SUMO-cdk9, para início dos testes de super expressão heteróloga da CDK9 humana fusionada à proteína SUMO, para a realização de ensaios de sua atividade na presença de inibidores.

Palavras-chave: CDK9. Inibidores. Caracterização estrutural.**Agência de fomento:** CNPq (164002/2021-9)**Referências:**

- 1 ALSFOUK, A. Small molecule inhibitors of cyclin-dependent kinase 9 for cancer therapy. **Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry**, v. 36, n. 1, p. 693-706, 2021. DOI:10.1080/14756366.2021.1890726.
- 2 ALENCAR, D. P. **Obtenção e caracterização estrutural da proteína humana Quinase dependente de Ciclina 9 (CDK9) utilizando o sistema bacteriano de Escherichia coli**. 2019. 84 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São

Paulo, São Carlos, 2019.

3 WANG, Z. *et al.* Human SUMO fusion systems enhance protein expression and solubility. **Protein Expression and Purification**, v. 73, n. 2, p. 203-208, 2010. DOI:10.1016/j.pep.2010.05.001

IC67

Development and application of nanopharmaceuticals from the repurposing of therapeutic agents against Covid-19: mucus-modulation studies.

PEDRIZ, Igor dos Santos; ZUCOLOTTI, Valtencir; FERREIRA, Leonardo Miziara Barboza; LEITE, Ana Elisa Tognoli; LEITE, Celisnolia Moraes; MIRANDA, Renata Rank; CARDOSO, Valéria Maria de Oliveira; NADDEO, Natália Noronha Ferreira

igorspedriz@usp.br

Apesar da eficiente estratégia de vacinação em massa contra a pandemia da Sars-CoV-2, novos surtos de variantes resistentes a tais vacinas surgem mundo afora, por exemplo a variante ômicron, logo, novas abordagens terapêuticas são necessárias para o tratamento da COVID-19. O antiviral remdesivir (RDV) foi o primeiro fármaco aprovado para o tratamento da COVID-19, moderado a grave. Ainda sim, é preciso uma revisão em sua aplicação clínica. Propriedades como baixa solubilidade, necessidade de altas doses para efeito biológico, alto custo e administração intravenosa que acarreta diversos efeitos colaterais, podem ser modulados a partir do delineamento experimental de nanocarreadores biocompatíveis. Nanopartículas (NP's) à base de ácido poli(lático-co-glicólico) (PLGA), com síntese otimizada pelo Grupo de Nanomedicina e Nanotoxicologia, foram planejadas para administração pulmonar, no entanto, a barreira protéica existente no epitélio das mucosas deve ser transposta a fim de aumentar a biodisponibilidade do fármaco. Para tanto, as dispersões das NP's-PLGA foram suplementadas pela adição de quatro diferentes combinações de biopolímeros (quitosana, COS, e dextrana, DS) a diferentes concentrações e proporções entre os mesmos. A saber: 0.5DS/0.1COS, 0.1DS/0.5COS, 0.25DS/0.025COS, 0.025DS/0.25COS, em mg/mL. As formulações foram analisadas quanto a sua interação com duas concentrações de mucina, principal proteína encontrada na mucosa, visando mimetizar as interações com a barreira biológica pulmonar. Em relação a adsorção com mucina, as nanoformulações que empregaram maior proporção de dextrana tiveram maior interação com mucina à pH5.0. Por sua vez, as com maior proporção de quitosana demonstraram interação dependente com a concentração total de mucina. Em especial, em baixa concentração total de biopolímeros, a associação com mucina demonstrou ser independente da proporção dextrana/quitosana e dependente da concentração de mucina total. Quanto à estabilidade dos nanocarreadores, em alta concentração de biopolímeros os valores em módulo do potencial zeta (ZP) aumentaram em pH7.4 e diminuíram em pH5.0 proporcionalmente à concentração de mucina. (1-3)

Palavras-chave: COVID-19. Biopolímeros. Mucina.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 BEIGEL, J. H. *et al* . Remdesivir for the treatment of Covid-19 — final report. **New England Journal Medicine**, v. 383, p. 1813–1826, 2020.

2 CIOTTI, M. *et al* . The COVID-19 pandemic. **Critical Review Clinical Laboratory Science**, v. 57, n. 6, p. 365–388, 2020.

3 U. S. FOOD & DRUG. **FDA approves first treatment for COVID-19**. 2020. Disponível em: <https://www.fda.gov/news-events/press-announcements/fda-approves-first-treatment-covid>. Acesso em: 2 maio 2022.

IC68

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

GOMES, Yara Hellen Firmo; ECKERT, Hellmut

yaragomes@usp.br

Desde a publicação pioneira reportando a habilidade de certos vidros no diagrama de composição $\text{SiO}_2 - \text{CaO} - \text{Na}_2\text{O} - \text{P}_2\text{O}_5$ para juntar material ósseo sem formar tecido fibroso ao redor deles ou promover inflação ou toxicidade (1), pesquisa e desenvolvimento de vitrocerâmicas e vidros bioativos promoveram melhora da qualidade de vida. Dependendo da aplicação pretendida, aditivos podem ser adicionados para melhor performance. O gálio, particularmente, é um elemento semi-metálico que vem sendo usado na detecção de imagens e tratamento terapêutico de diversos distúrbios, como reabsorção óssea acelerada, doenças infecciosas/autoimunes e câncer. (2) Até o momento, entretanto, não há conhecimento sobre a relação entre os detalhes de sua incorporação estrutural as e propriedades bioativas. Para explorar esse assunto, a espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) oferece uma abordagem inerentemente quantitativa e experimentalmente flexível, podendo dar respostas específicas sobre o grau de polimerização da rede estrutural do vidro, a distribuição espacial das espécies e as funções estruturais dos elementos introduzidos nessas redes. O presente trabalho propôs-se a estudar vidros bioativos dopados com gálio, derivados de fusão e derivados do processo *sol-gel*, utilizando RMN como ferramenta principal e técnicas de caracterização adicionais. Para os vidros derivados de fusão, foram produzidas 7 amostras de Biosilicato[®] dopadas com gálio, de composição $[(49, 16 - x)\text{SiO}_2 - (23, 33)\text{Na}_2\text{O} - (25, 79)\text{CaO} - (1, 72)\text{P}_2\text{O}_5 - (x)\text{Ga}_2\text{O}_3]$, onde $x = 0, 1, 2, 4, 6, 8, 10$ mol%. Estas amostras foram submetidas a medidas de DSC e estudos de RMN para os núcleos de ^{29}Si , ^{31}P , ^{23}Na e ^{71}Ga . Os resultados das medidas de DSC apresentam um aumento da temperatura de transição vítrea com o aumento do teor de Ga da amostra, indicativo da diminuição do número de átomos O não-ligantes. Já os espectros RMN indicam que o gálio encontra-se na coordenação 4 e que há formação de ligações Ga-O-Si com o aumento do teor do gálio na amostra, assim como um efeito de proximidade e interação dos átomos de P e Ga. Nessas medidas, não se nota diferenciação entre as espécies de Na compensando a mudança de O não-ligantes na amostra de 0%Ga e neutralizando as espécies de $\text{GaO}_{4/2}$ nas demais, resultado inesperado e que será explorado posteriormente. Para as amostras de *sol-gel*, foram preparadas amostras de composição $[(80 - x)\text{SiO}_2 - (15)\text{CaO} - (5)\text{P}_2\text{O}_5 - (x)\text{Ga}_2\text{O}_3]$ e $x = 0$ (mol%), modificando a quantidade de surfactante adicionado para otimizar a síntese. Medidas de fisiossorção de N_2 (BET/BJH) sugerem que a área de superfície das amostras mesoporosas não variam expressivamente pela razão template/sílica (240-280 m^2/g), mas que a distribuição do tamanho dos poros dos materiais pode ser influenciada por esta razão. A presente fase do estudo foca no desenvolvimento e otimização da síntese e caracterização dos vidros obtidos por *sol-gel* dopados com Ga, assim como na inserção do sódio na composição proposta. As novas amostras serão caracterizadas e a bioatividade (cinética de dissolução em fluidos corporais simulados, SBF) será testada, a fim de comparar as propriedades dos sets de amostras.

Palavras-chave: Vidros bioativos. Gálio. Ressonância magnética nuclear.

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

Referências:

- 1 HENCH, L. L.; POLAK, J. M. Third-generation biomedical materials. **Science**, v. 295, n. 5557, p. 1014-7, 2002. DOI: 10.1126/science.1067404.
- 2 KURTULDU, F.; MUTLU, M.; BOCCACCINI, A. R.; GALUSEK, D. Gallium containing bioactive materials: A review of anticancer, antibacterial, and osteogenic properties, **Bioactive Materials**, v. 17, p. 125-146, 2022. DOI: 10.1016/j.bioactmat.2021.12.034.

IC69

Avanços na aplicação e monitoramento da terapia fotodinâmica

ARAÚJO, Fabiana; CARVALHO, Felipe; GARCIA, Marlon; PRATAVIEIRA, Sebastião

fabianaaraujo@usp.br

O objetivo do presente trabalho é o desenvolvimento de uma interface gráfica intuitiva capaz de monitorar e controlar um sistema que realiza Terapia Fotodinâmica para tratar câncer de pele. Para aprimorar o sistema de monitoramento e tratamento da terapia fotodinâmica descrito por Garcia *et al.* (1), de forma a automatizar e facilitar alguns processos, utiliza-se ferramentas da linguagem Python para criação da interface, comunicação entre periféricos e armazenamento de dados. Para o desenvolvimento da interface gráfica utiliza-se o software *QtDesigner* (2), juntamente com a biblioteca *PyQt5*, da linguagem Python. O software da Qt possibilita o desenvolvimento de uma interface gráfica moderna e de fácil utilização, enquanto a biblioteca *PyQt5* permite a ligação entre a linguagem e a interface, atrelando o design às funcionalidades. Além de fazer o controle de cada tratamento através da identificação do usuário, a interface também conta com uma área de visualização da lesão em tempo real, e aquisição de imagens a cada intervalo de tempo, utilizando um sistema de processamento paralelo, para acompanhar a evolução do tratamento. A interface gráfica desenvolvida integra a visualização de imagem em tempo real, onde a cada intervalo de tempo pré-estabelecido um frame é capturado e armazenado na seção do usuário correspondente. O dispositivo de câmera utilizado é o DCC1545M, da *ThorLabs*. Para controlar o tempo em que cada frame foi capturado e manter a interface responsiva durante o processamento paralelo, utiliza-se o sistema de threads. A escolha do ambiente de desenvolvimento e da linguagem se mostra eficiente para promover maior usabilidade e integração do sistema. Como encaminhamentos futuros, as imagens adquiridas podem ser processadas, em tempo real, para serem obtidos dados da fluorescência na região da lesão, exibidos num gráfico diretamente na interface principal.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Monitoramento.

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

Referências:

- 1 GARCIA, M. R. *et al.* Development of a system to treat and online monitor photodynamic therapy of skin câncer using PpIX near-infrared fluorescence. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 30, n. 10, p. 101680, 2020.
- 2 THE QT COMPANY. **Qt designer manual**. 2022. Disponível em: <https://doc.qt.io/qt-5/qt designer-manual.html>. Acesso em: 30 ago. 2022.

IC70

Cálculo da densidade de estados através dos métodos marching cubes e marching tetrahedra

MAZZIERO, Mateus Lopes; SIPAHL, Guilherme Matos

mateus.mazziero@usp.br

Estudo da aplicação dos métodos “Marching Cubes” e “Marching Tetrahedra” (1) ao campo escalar das autoenergias dentro da Zona de Brillouin (2) para obter a densidade de estados em um material semicondutor. Também foi estudada a implementação de um processo auto-consistente (3) do cálculo da densidade de estados, usando resultados obtidos no framework computacional do grupo de pesquisa.

Palavras-chave: Semicondutor. Densidade de estados. Marching cubes.

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

Referências:

- 1 LORENSEN, W. E.; CLINE, H. E. Marching cubes: a high resolution 3D surface construction algorithm. **ACM SIGGRAPH Computer Graphics**, v. 21, n. 4, p 163–169, July 1987.
- 2 KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**. 8th ed. New York: Wiley, 2004.
- 3 CARDONA, M.; YU, P. **Fundamentals of semiconductors : physics and materials properties**. 4th ed. Berlin: Springer, 2004.

IC71

Estudo da fotodegradação da curcumina na presença do iodeto de potássio para inativação microbiana

CRUZ, Simão Torres; BAGNATO, Vanderlei Salvador; PRATAVIEIRA, Sebastião; ALVES, Fernanda

simaotcruz@usp.br

A mortalidade devido a doenças infecciosas diminuiu drasticamente comparado ao século passado, tendo uma queda de 78,8% de quando comparado os anos 1901 e 2000. Essa melhoria é dada graças à descoberta dos antibióticos que conseguiram de forma efetiva reduzir a mortalidade por tais agentes infecciosos que em sua maioria são causados por bactérias. (1) O antibiótico é uma medicação usada na prevenção e tratamento das infecções bacterianas cuja sua função consiste em matar e inibir o crescimento das bactérias, porém, devido a utilização maciça dos antibióticos nas últimas décadas, um decréscimo em sua eficiência foi notado, dificultando cada vez mais a inativação bacteriana. Isso aconteceu devido a capacidade das bactérias de se adaptarem ao meio seletivo da ação dos antibióticos causando o aparecimento de uma resistência bacteriana. Diferentes mecanismos de defesa foram desenvolvidos pelas bactérias, sendo os principais a bomba de fluxo, inativação enzimática e alterações no sítio de ligação. Além desses, também existem mecanismos físicos de resistência como o biofilme, que é um aglomerado de células com um grau elevado de organização por uma matriz exopolissacarídica, que torna muito difícil combater as bactérias quando apresentam esse tipo de organização. (2) Como um meio alternativo aos antibióticos terapias alternativas emergiram com possíveis soluções para combater a resistência microbiana como é o caso da terapia fotodinâmica PDT, que consiste na combinação de efeitos fotofísicos e fotoquímicos para causar morte celular, se utilizando de um composto fotossensível (FS) que quando exposto a um comprimento de onda específico e na presença de oxigênio ocorre a formação de espécies reativas de oxigênio (ROS) que induzem morte celular através de necrose e apoptose, e ao contrário dos antibióticos a PDT não induz a resistência bacteriana e também possui mínimos efeitos colaterais e sistêmicos. Entretanto, devido aos diversos mecanismos de defesas das bactérias, diversas estratégias vêm sendo avaliadas para aumentar a efetividade da PDT antimicrobiana, uma delas é a utilização de sais inorgânicos em associação com o FS. Foram realizados estudos que viram que o iodeto de potássio (KI) tem um alto efeito benéfico na PDT antimicrobiana quando combinado com FS que age principalmente pela produção de oxigênio singlete. (3) Dito isso, o objetivo deste estudo é analisar os efeitos de fotodegradação que o KI promove quando combinado com o fotossensibilizador curcumina (Cur).

Palavras-chave: Fotoinativação. Curcumina. Iodeto de potássio. Fotodegradação.

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

Referências:

1 BUCHALLA, C. M.; WALDMAN, E. A.; LAURENTI, R. A mortalidade por doenças infecciosas no início e no final do século XX no Município de São Paulo. **Revista Brasileira de Epidemiologia**, v. 6, n. 4, p. 335-344, 2003.

2 WISE, R. Antimicrobial resistance: priorities for action. **Journal of Antimicrobial Chemotherapy**, v. 49, n. 4, p. 585-586, 2002.

3 HAMBLIN, M. R. Potentiation of antimicrobial photodynamic inactivation by inorganic salts. **Expert Review of Anti-Infective Therapy**, v. 15, n. 11, p. 1059-1069, 2017.

IC72

Interação entre nanopartículas de fuligem em diferentes ambientes: um estudo das mudanças das características ópticas e suas consequências

PRADO, Ana Paula Glavocic de Almeida; VICENTE, Maria Luiza Ferreira; GUIMARAES, Francisco Eduardo Gontijo

apgap@usp.br

As subunidades de fuligem, compostas por nanopartículas (NP), podem influenciar na saúde humana e no meio ambiente (1), sendo possível identificá-las em diferentes tecidos humanos através de microscopia de fluorescência confocal e outros ambientes após a coleta. Estudamos seus arranjos de aglomerados e sua morfologia por auto-interação em diferentes condições físico-químicas para revelar como eram na natureza. Os materiais foram coletados de um filtro de ar (FNP) e de um Exaustor de Diesel (DEP). Na sequência, foi suspenso em meio aquoso alcalino, NaOH, para a separação das subunidades. As amostras em medidas DLS nos mostram o diâmetro das nanopartículas, a microscopia confocal, sua morfologia e um possível efeito fotossensibilizador, e uma medida UV-Vis mostra a interação entre a luz e NP. Após, utilizarmos água Milli-Q e um tampão ABF com pH 12,0 para suspensão de DEP, alterando duas condições físico-químicas, o pH e a força iônica. Os diâmetros medidos aumentaram, pois a concentração de cargas negativas foi diminuindo juntamente com o pH mas, para o tampão, é possível que a força iônica e o maior número de íons em sua composição causem repulsão do meio com o material, facilitando a agregação do mesmo. Concluindo, essas nanopartículas têm interações governadas por condições físico-químicas do meio (2), o que pode ser observado em nossos experimentos com o tamanho medido a partir de DLS e imagens de microscopia confocal.

Palavras-chave: Nanopartículas. Poluição. HPA.

Agência de fomento: PUB-USP (1471)

Referências:

- 1 ROY, R. *et al.* Particulate matter bound polycyclic aromatic hydrocarbons: toxicity and health risk assessment of exposed inhabitants. **Atmospheric Environment**, v. 210, p. 47–57, Aug. 2019.
- 2 GROWNEY, D. J. *et al.* Is carbon black a suitable model colloidal substrate for diesel soot? **Langmuir**, v. 31, n. 38, p. 10358–10369, 2015. Doi: 10.1021/Acs.Langmuir.5b02017.

IC73

Síntese e caracterização de tintas de PEDOT:PSS: impacto dos parâmetros de síntese na condutividade elétrica do material.

CASTRO, Beatriz Souza; HIGUITA, German Dario Gomez; FARIA, Gregório

beatrizsouzacastro@usp.br

A “Internet das Coisas” diz respeito à revolução tecnológica cujo objetivo é associar objetos cotidianos à internet. As tecnologias de armazenamento que unem os mundos físico e digital utilizam a arquitetura de computadores von Neumann, que tem sido questionada em relação à sua longevidade e atual eficiência. Como uma alternativa para substituir tal arquitetura, o artigo “PEDOT:PSS de densidade de carga ajustável para aplicação em eletrodos neuromórficos orgânicos pós-sinápticos” (1) explorou a computação neuromórfica, procurando otimizar dispositivos orgânicos neuromórficos eletroquímicos (ENODes). Para isso, foi proposta a substituição do eletrodo de PEDOT:PSS comercial desdopado pela exposição ao vapor de polietilenoimina (PEI), por uma tinta sintetizada de poli(3,4-etilenodioxitiofeno) poliestireno sulfonato (PEDOT:PSS) com baixo nível de dopagem. Após a análise de quatro sínteses com diferentes proporções entre EDOT (monômero) e agente oxidante persulfato de potássio ($K_2S_2O_8$), observou-se uma relação direta entre a quantidade de oxidante e a formação de cadeias conjugadas de PEDOT:PSS. Porém, não houve uma correlação direta da quantidade do agente oxidante com a condutividade final do filme de PEDOT:PSS. Logo, o presente projeto teve como objetivo introduzir a estudante aos métodos sintéticos de polímeros conjugados, a partir do estudo do impacto da quantidade de agente oxidante na polimerização do EDOT. Objetiva-se, também, otimizar a quantidade deste oxidante na obtenção de filmes poliméricos com maior condutividade. Para a síntese das tintas utilizamos Poliestireno sulfonado comercial (PSS), EDOT, catalizador sulfato de ferro III ($Fe_2(SO_4)_3$) e o oxidante persulfato de sódio ($Na_2S_2O_8$). As razões molares entre o PSS e o EDOT, e do agente oxidante com o catalizador foram mantidas constantes ($PSS/EDOT = 1,9$; e $Na_2S_2O_8/Fe_2(SO_4)_3 = 0,0052$). A variação se deu entre a proporção do agente catalizador com a quantidades de monômero de EDOT adicionada, a saber, $Na_2S_2O_8/EDOT$: 0.75, 1 ou 1.25. As devidas quantidades de PSS, EDOT e catalizador foram misturadas por 10 minutos e, em seguida, o oxidante foi gotejado na mistura durante 5 horas. Após esse processo, a solução foi colocada sob agitação magnética por 24h. Ao final da polimerização, uma alíquota foi reservada para análise e o volume restante submetido a purificação via diálise. A espectroscopia das tintas, antes e depois da diálise, foi realizada usando um espectrofotômetro UV-Vis Hitachi U2900 e uma cubeta de quartzo de 10mm de caminho óptico. Finalmente, as soluções foram depositadas por drop-casting em vidros limpos e secos a $100^\circ C$ por 10 minutos. A condutividade final dos filmes foi determinada utilizando o método de quatro pontas, sugerindo pico de condutividade na razão $Na_2S_2O_8/EDOT$ de 1.25.

Palavras-chave: Síntese polimérica. Transistor eletroquímico. PEDOT.

Agência de fomento: CNPq (2021-3228)

Referências:

1 BARBOSA, H. F. P. *et al.* Tunable charge-density PEDOT: PSS for application in post-synaptic organic neuromorphic electrodes. **Advanced Electronic Materials**, v. 8, n. 21, p. 2100864, 2022.

IC74

Effect of milling time on structural properties of TiO₂: a study by Raman spectroscopy

VIANA, João Victor Silva; HUAMAN, José Luis Clabel

vianajoao@usp.br

Intrinsic point defects and structural changes strongly affect the physical and chemical properties of TiO₂. (1-2) The effect of milling time on the structural and electronic properties of TiO₂ powder was then investigated using Raman spectroscopy and luminescence. The related structural properties of the milled nanoparticles were analyzed from peak shift and integrated Raman intensities in spectra Raman. Comparing the time milling of 0 hours and 48 hours using propanol-2 as a solvent in the milling process shows that milled nanoparticles are significantly more reactive with the time milling (48 hours). This is due to an increase in the surface-specific area. (3) Besides that, a narrowing of the peak and slight shift at 536.1 cm⁻¹, 537.6 cm⁻¹, 543.4 cm⁻¹, 547.0 cm⁻¹ and 550.7 cm⁻¹, was observed. Such an effect can result in structural distortion or bond breakage of the symmetrical and asymmetrical bending vibration of the O-Ti-O bonds, the latter giving rise to the generation of active sites on the surface. Altogether, our results provide evidence of important differences between the structures, and electronics properties with grinding times of 0 and 48 hours.

Palavras-chave: Raman. Nanoparticles.**Agência de fomento:** CNPq (Não se aplica)**Referências:**

- 1 LIU, L.; CHEN, X. Titanium dioxide nanomaterials: self-structural modifications. **Chemical Reviews**, v. 114, p. 9890–9918, 2014. DOI: 10.1021/cr400624r.
- 2 DAHL, M.; LIU, Y.; YIN, Y. Composite titanium dioxide nanomaterials. **Chemical Reviews**, v. 114, p. 9853–9889, 2014. DOI: 10.1021/cr400634p.
- 3 BAI, J.; ZHOU, B. Titanium dioxide nanomaterials for sensor applications. **Chemical Reviews**, v. 114, p. 10131–10176, 2014. DOI: 10.1021/cr400625j.

IC75

Processamento de dados na espectroscopia Raman

MILITAO, Lucas; ELLENA, Javier Alcides

lucas.milito@usp.br

A Espectroscopia Raman, que envolve o fenômeno de espalhamento inelástico da luz, é utilizado para identificar modos vibracionais de uma molécula. Para a análise de espectros é utilizado o deslocamento Raman, que é a diferença de energia entre a luz da fonte monocromática incidente e a da luz espalhada. Essa diferença pode ser interpretada como a energia dos modos vibracionais da molécula ou de grupos funcionais. Variando o comprimento de onda da fonte monocromática incidente é possível evitar fenômenos indesejados, tais como fluorescência, que podem interferir na qualidade dos dados coletados. Neste trabalho são abordados passos seguintes a coleta de dados pelo espectrômetro, os passos de processamento, interpretação e comparação de dados. Esses passos serão realizados por um software em desenvolvimento nesse projeto. O foco desse projeto é na identificação dos grupos funcionais de uma molécula, tal como um insumo farmacêutico ativo (IFA), a partir do tratamento de dados provenientes da espectroscopia Raman. Uma pergunta contundente seria o porque não utilizar espectroscopia de absorção ou outros tipos de espectroscopia. O motivo principal para escolha da espectroscopia Raman é que ela pode ser utilizada sem preparação da amostra sendo também não destrutiva o que permite que seja utilizada diretamente na linha de produção para controle de qualidade dos fármacos. Resultados preliminares incluem uma interface e uma framework de desenvolvimento selecionada. Foi implementado o método de Savitzky-Golay (1) para diminuição de ruído. Também é planejada a implementação de algoritmos customizados para remoção de ruído. (2) O uso de cristalografia Raman (3) também é uma proposta que será abordada na continuação do projeto já aprovada pelo CNPq.

Palavras-chave: Espectroscopia. Raman. Física do estado sólido.

Agência de fomento: CNPq (148753/2021-3)

Referências:

- 1 BARTON, S.; WARD, T.; HENNELLY, B. Algorithm for optimal denoising of Raman spectra. *Analytical Methods*, v. 10, n. 30, p. 3759-3769, 2018.
- 2 GALLAGHER, N. **Savitzky-Golay smoothing and differentiation filter**. 2020. Disponível em: <https://eigenvector.com/wp-content/uploads/2020/01/SavitzkyGolay.pdf>. Acesso em: 10 ago. 2022.
- 3 TUSCHEL, D. **Raman crystallography**. 2022. Disponível em: <https://www.spectroscopyonline.com/view/raman-crystallography>. Acesso em: 9 ago. 2022.

IC76

Cadeia de Kitaev e Majorana nanowire: propriedades topológicas e espectrais

SANTOS, João Gabriel de Oliveira; PENTEADO, Poliana Heiffig; MENEZES, Jose Carlos Egues de
joaog.santos@usp.br

Nosso objetivo nesse trabalho é obter as propriedades topológicas e espectrais de uma cadeia de Kitaev e do chamado Majorana nanowire, composto por um fio quântico na presença de spin-órbita do tipo Rashba, de um campo magnético Zeeman paralelo ao fio e de supercondutividade do tipo s (s-wave) induzida. A cadeia de Kitaev simula o Majorana nanowire em um dado regime de parâmetros. Aqui queremos investigar a validade da equivalência entre esses dois modelos. (1) Utilizamos o formalismo de Bogoliubov-de-Gennes (BdG) para obter o espectro de energias de uma cadeia de Kitaev tanto no caso de condições de contorno periódicas (bulk), quanto no caso de um sistema finito (condições de contorno abertas). (2-3) Nesse projeto, nós inicialmente analisamos analiticamente o espectro de energias e as autofunções do sistema em bulk. Em seguida calculamos numericamente o espectro em função dos parâmetros do sistema e estudamos o aparecimento dos estados de borda e a sua relação com a topologia do sistema.

Palavras-chave: Majorana férmions. Cadeia de Kitaev. Topological edges.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

- 1 HAINING, P.; DAS SARMA, S. **Majorana nanowires, Kitaev chains, and spin models**. 2022. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2208.06108.pdf>. Acesso em: 30 ago. 2022.
- 2 KITAEV, A Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. **Physics-Uspekhi**, v. 44, n. 10S, p. 131, 2001.
- 3 LEUMER, N. *et al.* Exact eigenvectors and eigenvalues of the finite Kitaev chain and its topological properties. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 32, n. 44, p. 445502, 2020.

IC77

Junções NS com supercondutores topológicos

COSTA, João Pedro Carvalho; MENEZES, Jose Carlos Egues; PENTEADO, Poliana H.

joaopedro137@usp.br

O seguinte estudo se propõe a procurar e verificar os picos de condutância zero bias (ZBCP) como assinaturas dos estados do estado de Majorana em energia zero (MZM) em junções de supercondutores topológicos com metais. (1) Foi aplicado o formalismo BTK (2) como método para extrair as probabilidades dos processos de espalhamento e, a partir desses valores, calcular as grandezas de transporte do sistema como a sua condutância sob aplicação de uma diferença de potencial nas leads do sistema. As curvas de condutância obtidas apresentaram um pico de condutância em estados com energia zero característica apenas na fase topológica do supercondutor quando comparada com a condutância em energia zero na fase trivial. Esses picos tinham diferentes formas e larguras a medida que se aumenta a energia, mas sempre mantendo o mesmo valor da condutância zero-bias. Além disso, foi observado o aparecimento de singularidades de Van Hone tanto nas curvas de condutância na fase topológica com junção transparente, como na junção com transparência parcial. Essas singularidades são comuns de se obter a medida que as energias dos estados das leads tendem a se aproximar do fim do gap de energia do supercondutor. Mas, quando o supercondutor está no Mexican Hat regime, mais uma singularidade pode ser identificada nas curvas de condutância devido a presença das bandas de quasi-buracos no supercondutor. O material introduzido nesse estudo permite expandir a análise dos MZM para junções N-S com impurezas nas leads e com confinamento, como mostra. (3) Essas novas plataformas de estudo podem prever novas assinaturas nas condutâncias que se aproximem mais dos resultados experimentais, uma vez que o modelos se tornam mais realísticos.

Palavras-chave: Modos de Majorana. Junções NS. Formalismo BTK.

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

Referências:

- 1 SETIAWAN, F. *et al.* Conductance spectroscopy of topological superconductor wire junctions. **Physical Review B**, v. 91, p. 214513, 2015.
- 2 BLONDER, G.' E.; TINKHAN, M.; KLAPWIJK, T. M. Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion. **Physical Review B**, v. 25, p. 4515, 1982.
- 3 CAYAO, J.; BURSET, P. Confinement-induced zero-bias peaks in conventional superconductor hybrids. **Physical Review B**, v. 104, p. 134507, 2021.

IC78

Expressão e purificação do complexo ZIKV NS2B-NS3 protease para triagem de candidatos antivirais

DOLCI, Isabela; NOSKE, Gabriela Dias; SILVA, Ellen Sousa; FERNANDES, Rafaela; OLIVA, Glaucius

isabela@estudante.ufscar.br

O vírus Zika (ZIKV) é o agente causador da febre zika, uma doença transmitida por mosquitos que se tornou um problema de saúde pública em 2015/2016 nas Américas e principalmente no Brasil, onde estava relacionado com os casos de microcefalia e síndrome de Guillain-Barré. O potencial do vírus para reaparecer causando novas epidemias está sempre latente e, por conseguinte, há uma necessidade urgente de descoberta e desenvolvimento de tratamentos específicos contra a infecção viral, uma vez que ainda não existem vacinas ou antivirais disponíveis. Os ensaios baseados em enzimas virais são estratégias úteis para testar grandes bibliotecas de compostos para inibidores de ZIKV. O domínio da protease NS3, que requer NS2B como seu co-factor, é responsável pela clivagem da poliproteína viral imatura nas proteínas NS maduras, representando assim um alvo interessante para o desenvolvimento de medicamentos. (1) O objetivo deste trabalho foi expressar, purificar e validar a atividade da protease recombinante da protease de Zika Vírus, ZIKV NS2B-NS3pro, para utilizá-la como alvo na busca de antivirais, por meio da avaliação de grandes bibliotecas de compostos em ensaios de atividade enzimática. (2) Para a obtenção da protease recombinante de ZIKV, foi utilizada uma construção contendo os resíduos 45-96 do cofator NS2B ligados covalentemente aos resíduos 1-177 do domínio protease da NS3 por um linker rico em glicina [G4SG4]. O plasmídeo utilizado, denominado gZiPro, contém ainda, uma região codificante para uma cauda 6xHIS-tag e proteína de fusão SUMO ambos na porção N-terminal da proteína de interesse². A enzima foi expressa em bactéria e purificada por meio de cromatografia de níquel-afinidade e cromatografia de exclusão molecular. O ensaio enzimático consistiu em medir a fluorescência liberada pelo substrato BZ-NKRR-AMC quando ocorre a clivagem deste pela proteína. A reação foi montada em placas de 384 poços, em tampão de reação, contendo 5 nM da NS2B-NS3pro e 10 μ M de Aprotinina, após 15 min de incubação à 37°C, a reação foi iniciada com adição de substrato em uma concentração final de 30 μ M. DMSO 1% foi utilizado como controle negativo. A enzima foi obtida conforme descrito e os resultados das etapas de purificação foram analisados por SDS-PAGE. A proteína foi obtida na 1ª afinidade com tamanho esperado (29 kDa), separada da SUMO-6xHIS-tag por diálise e ao final da cromatografia de exclusão molecular, a NS2B-NS3pro foi obtida com pureza adequada e um elevado rendimento final de aproximadamente 9 mg de proteína por litro de cultura bacteriana. A proteína purificada teve sua atividade avaliada, constatando ser ativa e capaz de clivar o substrato peptídico, atingindo níveis de fluorescência de 20.000 mAU. A atividade da aprotinina foi validada como inibidor, mostrando-se altamente eficaz em inibir a atividade proteolítica da enzima, mantendo os níveis de leitura próximos de 0. A protease recombinante de ZIKV foi expressa e purificada com rendimento suficiente para os ensaios subsequentes. Sua atividade foi validada com o substrato peptídico e o inibidor Aprotinina, dessa forma, validando o ensaio enzimático que será utilizado nas triagens de alta performance para avaliação de grandes bibliotecas de moléculas.

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

Agência de fomento: FAPESP (2021/01686-0)

Referências:

- 1 FERNANDES, R. S. *et al.* High-throughput antiviral assays to screen for inhibitors of Zika virus replication. **Journal of Visualized Experiments**, n. 176, p. e62422, 2021. DOI: 10.3791/62422.
- 2 PHOO, W. W. *et al.* Structure of the NS2B-NS3 protease from Zika virus after self-cleavage. **Nature Communications**, v. 7, n. 1, p. 1-8, 2016.

PG1

Aplicações de redes complexas e ferramentas de geometria computacional em sistemas dinâmicos

BISPO JUNIOR, Altamir Gomes; BRUNO, Odemir Martinez

altamir.bispo@usp.br

A análise numérica é uma disciplina que serve ao estudo dos sistemas dinâmicos e suas propriedades, a saber: estatísticas do sistema, comportamento a longo prazo, bifurcações, singularidades etc. Medidas de distância são comumente aplicadas entre pontos distintos da trajetória de um sistema dinâmico para quantificação desde relações simples entre os pontos da trajetória até agrupamentos de pontos e outros padrões subjacentes. A abordagem com geometria computacional abre um leque de algoritmos sofisticados, que perpassam a visualização intuitiva de gráficos que representam o sistema, chegando às malhas geométricas que se utilizam das relações trigonométricas já conhecidas e consagradas em objetos geométricos como triângulos e polígonos em geral. Deste modo, a abordagem com geometria computacional evidencia comportamentos a curto prazo e características locais do sistema que não são observadas a partir de outras abordagens. Objetos geométricos como Diagramas de Voronoi e a Triangulação de Delaunay ainda podem ser transformados em redes complexas, cujas características de relações entre nós, agrupamento, distribuição de graus, assortatividade etc. descrevem o sistema. O k -mapa logístico (1) é uma variação do mapa logístico com potencial para uso como gerador de números pseudoaleatórios. Nesta demonstração, relemos a abordagem de (2) e sua análise de trajetórias do k -mapa logístico.

Palavras-chave: Sistemas dinâmicos. Geometria computacional. Redes complexas.

Agência de fomento: CNPq (144323/2019-2)

Referências:

- 1 MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Improving the pseudo-randomness properties of chaotic maps using deep-zoom. *Chaos*, v.27,p.05116, 2017.
- 2 ALVES, M. L. **Classification of pseudo-random number generators by complex networks and computational geometry analysis**. 2019. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Ciências Matemáticas, Universidade de São Paulo, São Carlos,2019.

PG2

Uma visão sobre sistemas biológicos, comportamentos dinâmicos presentes na natureza e caoticidade

BISPO JUNIOR, Altamir Gomes ; PETROVSKII, Sergei; BRUNO, Odemir Martinez

altamir.bispo@usp.br

A modelagem matemática de sistemas biológicos, em função de limitações de desenho dadas incógnitas a respeito do espaço de estados do sistema que persistem após o devido estudo empírico, restringe-se então a determinados cenários e fronteiras de interesse. O trabalho de modelagem leva em consideração padrões de migração, de difusão e de relações entre espécies, a saber: competitiva, cooperativa ou predador-presa. Os padrões podem apresentar comportamento determinístico ou estocástico. O comportamento caótico determinístico é, em essência, indistinguível daquele estocástico. A partir de estudo amparado em análise quantitativa (1), observa-se que a caoticidade está mais presente nos sistemas biológicos do que se pensava. A análise rigorosa, as simulações numéricas e os dados sobre movimentação da vida selvagem e ecológicos são necessários para elucidar os comportamentos tanto de curto quanto de longo prazo do sistema subjacente aos dados.(2) Para todos os propósitos, as dinâmicas mais simples capazes de modelar razoavelmente tais sistemas são as mais desejáveis. Porém, sistemas na natureza estão muito propensos a perturbações, aumentando assim a complexidade do formalismo. É desejável a esta luz um formalismo que não seja complexo demais e que possa ser generalizado e aplicado a tantos cenários e fronteiras quanto for possível.

Palavras-chave: Modelagem matemática. Sistemas biológicos. Dinâmica populacional.

Agência de fomento: CNPq (144323/2019-2)

Referências:

- 1 ROGERS, T. L.; JOHNSON, B. J.; MUNCH, S. B. Chaos is not rare in natural ecosystems. **Nature Ecology & Evolution**, v.6,n.8,p.1105-1111.2022.
- 2 PETROVSKII, S. V.; LI, B. L. **Exactly solvable models of biological invasion**. Boca Raton: CRC Press,2005.

PG3

A complexidade quântica na presença de correção e prevenção de erros quânticos

HILARIO, Adonai

adonai.silva@usp.br

Teoria de complexidade é o estudo de recursos temporais e espaciais necessários para a resolução de problemas computacionais. Com o advento da computação quântica, a complexidade de algoritmos quânticos foi usualmente tratada sob o escopo de como o número de portas lógicas quânticas necessárias crescem conforme o tamanho do *input* do problema. Uma abordagem relativamente nova, por M. A. Nielsen (1), é baseada na ideia de que geodésicas na variedade do grupo de simetria das transformações de n qubits, o grupo $SU(2^n)$, dada uma escolha adequada de métrica, são curvas cujo comprimento corresponde a um limitante inferior da definição usual de complexidade quântica, isto é, o número de portas lógicas quânticas necessárias. A proposta de Nielsen é usar uma métrica Riemanniana para penalizar certas direções. Uma abordagem alternativa (2-3) consiste em usar geometria sub-Riemanniana, onde algumas direções são de fato proibidas, e as geodésicas só podem evoluir em direções que correspondem a um sub-espço do espaço tangente. O objetivo deste trabalho de doutorado é usar este formalismo de geometria sub-Riemanniana para estudar como a presença de ruídos, e posteriormente, como a presença de métodos de correção, influenciam na complexidade de um problema. Inicialmente estamos estudando o caso de um único *qubit* sujeito a ruído de decoerência. Tal sistema pode ser simulado fazendo uso do conceito de purificação quântica e um *qubit* auxiliar. O objetivo é encontrar geodésicas que conectam a identidade a uma operação unitária suficientemente próxima da ideal, apesar da presença de ruídos. O principal problema é que a equação de geodésica para uma operação unitária desejada é dependente de condições iniciais para o operador Hamiltoniano que são, em princípio, desconhecidas. Como uma primeira tentativa, pretendemos usar aprendizado de máquina, especificamente redes neurais, que consigam correlacionar operações unitárias às condições iniciais do Hamiltoniano para a equação da geodésica. Isto constitui apenas o primeiro estágio deste trabalho. A intenção é que possamos generalizar este método para sistemas multi-qubit e sob a ação de outros tipos de ruído, como de amortecimento de fase. Eventualmente, pretendemos também analisar a influência que algoritmos de correção de erro e métodos de proteção, como desacoplamento dinâmico, exercem sobre a complexidade.

Palavras-chave: Complexidade. Geodésica. Unitária.

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

Referências:

- 1 NIELSEN, M. A. **A geometric approach to quantum circuit lower bounds**. 2005. Disponível em: arXiv preprint quant-ph/0502070. Acesso em: 23 ago. 22.
- 2 SWADDLE, M. *et al.* Generating three-qubit quantum circuits with neural networks. **Physics Letters A**, v. 381, n. 39, p. 3391-3395, 2017.

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

PG4

Reconciliando a dissipação não linear com o modelo bilinear para duas partículas Brownianas

GOETTEMS, Elisa Iahn; PINTO, Diogo Soares; VALENTE, Daniel Mendonça; AFONSO, Ricardo

elisagtt@ifsc.usp.br

Para uma partícula Browniana a abordagem sistema-reservatório tem sido usada para derivar equações de movimento da dinâmica reversível de um sistema acoplado com um banho de osciladores. (1) Neste trabalho, revisitamos o cenário com duas partículas Brownianas imersas num banho comum. Há duas maneiras de tratar esse problema, com acoplamentos entre partículas e banho bilinear (1) e não linear. (2) Utilizando a abordagem com acoplamento bilinear temos equações de movimento do tipo partícula livre para a coordenada relativa e sem efeitos entre partículas próximas. Por isso, o acoplamento do tipo exponencial vem sendo empregado. Neste trabalho exploramos uma maneira de reconciliar ambos acoplamentos. Demonstramos como obter a mesma expressão para taxa de dissipação não linear partindo de uma Lagrangiana bilinear. Para isso foi introduzido uma função espectral modificada que depende da distância relativa entre as partículas e que conecta essas abordagens. Implementamos uma função espectral modificada para contornar a difusão anômala que apareceria do modelo usual não linear, juntamente com a modelagem fenomenológica de uma interação hidrodinâmica entre as partículas Brownianas em um fluido viscoso.(3)

Palavras-chave: Movimento Browniano. Função espectral. Equação de Langevin.

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

Referências:

- 1 CALDEIRA, A. O. **An introduction to macroscopic quantum phenomena and quantum dissipation.** Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- 2 DUARTE, O.; CALDEIRA, A. Effective coupling between two Brownian particles. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 25, p. 250601, 2006.
- 3 ERMAK, D. L.; MCCAMMON, J. A. Brownian dynamics with hydrodynamic interactions. **Journal of Chemical Physics**, v. 69, n. 4, p. 1352, 1978.

PG5

Using one- and two-photon absorption effects for molecular first-order hyperpolarizability dispersion measurements in organic molecules

SCIUTI, Lucas; ABEGAO, Luis; COCCA, Leandro Zucolotto; SANTOS, Carlos Henrique D. dos; COSTA, Rafaela da; LIMBERGER, Jones; MISOGUTI, Lino; MENDONÇA, Cleber; BONI, Leonardo de

lfsciuti@gmail.com

The first-order hyperpolarizability (β) is a microscopic optical parameter associated with a hyper-Rayleigh scattering with the second-order electrical susceptibility (χ^2) as the macroscopic counterpart. The knowledge of both parameters is important for certain optical applications of organic molecules. For instance, the electro-optical coefficient (EO) is related with β and it is the quantity that characterizes the molecule as suitable for molecular EO modulators. (1) Further, the second harmonic generation (SHG) is connected to χ^2 . (2) However, the direct experimental measurement of β for a particular wavelength and, in particular, its dispersion $\beta(\lambda)$ is a complex and expansive task still nowadays. Therefore, we investigate the application of a complete phenomenological model for calculate $\beta(\lambda)$ (3) for arylated chalcone derivatives dissolved in dichloromethane (DCM). The central frequencies, linewidth and the transition electric dipole moment of the molecule's electronic excited states were measured through one-photon absorption spectra. Permanent electric dipole moment differences between the excited states and the ground one were obtained by fitting the Sum-over-States (SOS) model for the two-photon absorption spectrum measured with the absorptive Z-Scan technique. The molecules showed three experimental decomposed electronic excited states which leads to a four-level phenomenological model. The results of the phenomenologically calculated $\beta(\lambda)$ were compared to the vastly used quantum chemical calculations (QCC) for β . The values obtained from both models were equivalent for the static hyperpolarizability (β_0) and for the dynamic one in the spectral range considered. The application of the non-simplified phenomenological model revealed two-photon resonances and tend to be a fast tool to achieve the dispersion of β through easily obtained experimental parameters.

Palavras-chave: First hyperpolarizability. Chalcone molecules. Two-photon absorption.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 BALE, D.H.; EICHINGER, B.E.; LIANG, W. ; LI,X.; DALTON, L.R; ROBINSON, B.H., REID, P.J. Dielectric dependence of the first molecular hyperpolarizability for electro-optic chromophores, **Journal Physical Chemistry B**. v.115, p. 3505–3513, 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/jp109870y>. Acesso em: 29.08.22.

2 MINIEWICZ, A. *et. al.* Second harmonic generation in nonlinear optical crystals formed from propellane-type molecules, **Journal Material Chemistry C**. v.7, p. 1255–1262, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/c8tc05268a>. Acesso em: 29.08.22.

3 ORR, B.;WARD, J. F. Perturbation theory of the non-linear optical polarization of an isolated system, **Molecular Physics** v.20, n.3, p.513–526, 1971. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00268977100100481>. Acesso em: 29.08.22.

PG6

Estudo da interação entre filamentos de septinas

MENDONÇA, Deborah Cezar; PORTUGAL, Rodrigo Villares; GARRATT, Richard; KLAHOLZ, Bruno

deborah.mendonca@usp.br

Septinas são GTPases do citoesqueleto envolvidos em uma série de importantes processos intracelulares incluindo divisão celular, tráfego de vesículas, exocitose, entre outros. Foi também relatado seu papel na formação de barreiras que impedem a difusão livre de componentes da membrana plasmática. (1) Em humanos, alterações nos níveis de expressão das septinas ou mutações estão relacionadas com diversas doenças, como alguns tipos de câncer, infertilidade masculina e doenças neurodegenerativas como Alzheimer e Parkinson. Essas proteínas são capazes de interagir entre si e formar heterocomplexos, hexâmeros ou octâmeros em humanos, que por sua vez podem se polimerizar e formar filamentos. Esses filamentos, subsequentemente, interagem entre si para formar estruturas organizadas como redes e anéis. Porém, a maneira como os heterocomplexos se agrupam corretamente ainda não é completamente compreendida. A técnica de cristalografia de raios-X tem sido amplamente usada para o estudo de monômeros e dímeros de septinas, entretanto, não é viável obter cristais proteicos e estruturas de alta resolução de complexos de septinas completos. Recentemente foi possível obter uma estrutura de alta resolução de um hexâmero de septinas utilizando a técnica de criomicroscopia eletrônica de transmissão (Crio-ME), revelando diversos detalhes estruturais importantes para uma melhor compreensão das interações entre cada unidade de septina que compõe o complexo. (2) Para entender melhor o processo de polimerização em filamentos, o estudo atual tem o objetivo de utilizar uma combinação de Crio-ME e Crio-tomografia eletrônica para explorar as regiões responsáveis pela interação entre filamentos pareados. Acredita-se que essas interfaces são estabilizadas pela formação de superhélices presentes na região C-terminal dessas proteínas. A purificação e preparação das amostras estão em progresso e uma primeira análise por Crio-ME será apresentada. A utilização dessas técnicas pode contribuir com um melhor entendimento do mecanismo de polimerização e da relação estrutura-função das septinas.

Palavras-chave: Septinas. Filamentos. Criomicroscopia eletrônica.

Agência de fomento: FAPESP (2021/10247-0)

Referências:

- 1 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews**, v.13, n.3, p. 183-194, March 2012.
- 2 MENDONÇA, D.C. *et al.* An atomic model for the human septin hexamer by cryo-EM. **Journal of Molecular Biology**, v.433, n.15, p.167096, June 2021.

PG7

Two-photon absorption and multiphoton excited fluorescence of acetoamide-chalcone derivatives: The importance of dimethylamine group on the nonlinear optical and photophysical properties

PELOSI, André; VALVERDE, João Victor; COCCA, Leandro Zucolotto; GONÇALVES, Pablo; SILVEIRA-ALVES JUNIOR, Eli; SILVA, Daniel; BONI, Leonardo de ; MENDONÇA, Cleber

andre.gasparotto.pelosi@gmail.com

Chalcones, also known as α , β -unsaturated ketones, are present in several optical applications, such as second harmonic generation, photorefractive polymers and holographic recording technology, to name a few. In addition, owing its versatile synthesis and electron-mobility, chalcones have been extensively studied for modulation of third-order nonlinearities. Moreover, when strong electron withdrawing and donating groups are grafted to chalcone backbone a high excited emissive state could be created making possible applications related to DNA spectroscopy and metal ions detection.(1) In this regard, fluorescent-based chalcones are excellent candidates for fluorescence microscopy applications because besides the high biological activity and low toxicity of chalcones derivatives, they present low interference with the target of interest. (2) Considering the importance of chalcones derivatives, in this work an experimental and theoretical study in eight chalcone derivatives was performed. Measurements of linear absorption were made for all compounds as well 2-photon absorption (2PA) cross section through the femtosecond tunable Z-Scan technique. (3) In case of compound with dimethylamine group a high fluorescence quantum yield (80% in DMSO) was observed and a deep spectroscopy investigation was conducted. Measurements of fluorescence emission, fluorescence quantum yields for different solvents, fluorescence lifetime, solvatochromism and multiphoton excited fluorescence were made. Besides, an important increase on the 2PA cross section value (54 GM) at 800 nm was observed when compared with the other compounds (18 GM). In addition, the phenomenological SOS approach was applied to model the 2PA results and showed good agreement with the experimental results revealing an important feature about the coupling of excited state of the studied compounds.

Palavras-chave: Two-photon absorption. Multiphoton excited fluorescence. Chalcone derivatives.

Agência de fomento: CAPES (88887.670926/2022-00)

Referências:

- 1 GABER,M.; EL-DALY, S.A.; FAYED, T.A.; EL-SAYED,Y.S. Photophysical properties, laser activity and photoreactivity of a heteroaryl chalcone, **Optics Laser Technology** v.40,n.3,p.528-537, 2008. Disponível em:<https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2007.08.006>. Acesso em: 29.08.2022.
- 2 ZHOU, B.; JIANG, P. ; LU, J.;XING, C. Characterization of the fluorescence properties of 4-dialkylaminochalcones and investigation of the cytotoxic mechanism of Ccalcones, **Archiv der Pharmazie**,v.349,p. 539–552,2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/ardp.201500434>. Acesso

em: 29.08.2022.

3 SHEIK-BAHAE,M.; SAID, A.A.; WEI, T.; HAGAN, D.J.; VAN STRYLAND, E.W. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam, **IEEE Journal Quantum Electronics** v. 26, p.760-769,1990. Disponível em: <https://doi.org/10.1109/3.53394>. Acesso em: 29.08.22.

PG8

Higher-order QCD in Higgs to gluon-gluon

BOITO, Diogo; NOGUEIRA, Guilherme

ga.nogueira@usp.br

In this work we will produce a model independent estimate of the series at higher orders using rational approximants, also known as Padé approximants, in combination with the Borel transform of the series - a technique known as Padé-Borel method. The QCD amplitude for this process is calculated in an effective field theory where the top quark is considered to be very heavy, and an expansion in the inverse of the top-quark mass is performed. In the process, the gluon-gluon correlator must be evaluated. This correlator is known to all orders in the strong coupling in the large- β_0 limit of QCD. (1) This allows for precise tests of our Padé-Borel method in a concrete, if simplified, case, before applying the method to the full amplitude. Finally, we will study the truncation uncertainty in the light of our new results for the series at high orders using standard methods, such as renormalization scale variation, as well as modern techniques, such as Bayesian estimates of truncation errors.

Palavras-chave: Higgs boson. Resummation. Padé approximant.

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

Referências:

1 JAMIN, M. The scalar gluonium correlator: large- β_0 and beyond. **Journal of High Energy Physics**, v. 2012, n. 4, p. 1-14, 2012.

PG9

Effects of electromagnetic radiation on the mitochondria bioenergetics

PEREZ, Aline Sanches; INADA, Natalia; MEZZACAPPO, Natasha; VOLLET FILHO, Jose Dirceu; CASTILHO, Roger Frigerio; VERCESI, Anibal Eugenio; BAGNATO, Vanderlei Salvador

aline.perez@usp.br

Mitochondria were recently known as the main targets of electromagnetic radiation; they also play an important role in the cell maintenance. These organelles are responsible for more than 85% of the cell energy production in ATP molecules. Mitochondria are among the targets of photodamage, it is believed that once mitochondrial membrane permeability is affected by radiation it leads to cell apoptosi. (1) Despite the advances already achieved in the understanding of electromagnetic interaction with mitochondria, there are gaps regarding the detailed understanding of the action mechanism at atomic, cellular and bioenergetics levels, especially in the action of radiation outside the visible spectrum. This study proposes to investigate the effects of electromagnetic radiation, on X-ray, ultraviolet (UV) and microwave (MW) spectrum, on the bioenergetics of isolated mice liver mitochondria. The main parameters treated in this study are mitochondrial respiration and swelling, high resolution respirometer and spectrophotometer were used. This is the first study showing the immediately bioenergetics alterations, at mice liver mitochondria, systematically correlating mitochondrial respiratory paths and swelling due X-ray, UV and MW irradiation. Here, we shown that is a correlation between dose effects and electromagnetic wave nature, which has a linear behavior at UV and MW, but no direct nor linear correlation at X-ray spectrum, suggesting that we may also have other phenomenon contributing with mitochondria pathways once X-ray can ionizing atoms and molecules, specially water which is widely used in mitochondria respiration. In addition, all three radiations interfered with the viability of mitochondrial lipid membranes, especially the inner membrane which was investigated by mitochondrial swelling even in low doses. .

Palavras-chave: Electromagnetic effects. Isolated mitochondria. Respiratory paths.

Agência de fomento: CNPq (130160/2021-0)

Referências:

1 GREEN, D. R.; REED, J. C. Mitochondria and apoptosis. *Science*, v. 281, p.1309-12, 1998.

PG10

Search for exotic particles (Q-balls) in ultra-high energetic astroparticles.

PAULA, Tales de; SOUZA, Vitor de; ARBELETCHÉ, Luan Bonneau

ferrazdepaula@ifsc.usp.br

With an energy range from 10^{17} eV up to 10^{21} eV, Ultra-High-Energy Cosmic Rays (UHECR) particles can traverse the cosmos and reach Earth's atmosphere, starting a cascade of reactions, the so called extensive air showers, by interacting with its nuclei. Measurements about the primary particle can only be made indirectly by detection of the shower by large observatories, and, being so rare, much of the study on UHECR is done by Monte Carlo approach of air showers based on hadronic interaction models. With that said, and despite the significant advances of technology, much of UHECR is unknown. Its biggest mystery is its origin, and a better understanding of it is a fundamental piece of the puzzle to better understand the Universe, both on a microscopic and macroscopic scale. One possible candidate are exotic particles (1), and there is a very stable hypothesized supersymmetric particle that, despite being a candidate for cold dark matter, strongly interacts with matter, the Q-ball. (2) Since the UHECR energies are beyond human technology, UHECR data is a unique sample to search for new physics. In this work we propose the study of air showers initiated by Q-ball based on simulations by Conex. (3) The objectives are to propose a method to differentiate air showers initiated by this exotic particle from others, and to apply this method in the Pierre Auger Observatory dataset for search for Q-balls. Results show that the method unambiguously differentiate the showers.

Palavras-chave: Física de astropartículas. Raios Cósmicos. Chuveiros atmosféricos.

Agência de fomento: CAPES (88887.602973/2021-00)

Referências:

- 1 BIERMANN, P.L. The origin of the highest energy cosmic rays. **Journal of Physics G : nuclear and particle physics**, IOP Publishing, v. 23, n. 1, p. 1, 1997. DOI: <https://doi.org/10.1088/0954-3899/23/1/002>.
- 2 ARAFUNE, J. *et al.* Experimental bounds of masses and fluxes of nontopological solitons. **Physical Review D**, APS, v. 62, n. 10, p. 105013, 2000. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.62.105013>.
- 3 MAYOTTE, E. W. **Searching for slow-developing cosmic-ray showers** : Looking for evidence of exotic primaries at the Pierre Auger Observatory. 2016. PhD Thesis - Colorado School of Mines, Colorado, 2016.

PG11

Structural and biophysical investigations into vitamin B6 synthase assembling

BARRA, Angelica; NASCIMENTO, Alessandro Silva

angelica.barra@usp.br

Infectious diseases are one of the leading causes of death in the world and the number of antibiotic-resistant infections is increasing, according to the World Health Organization (WHO). *Staphylococcus aureus* methicillin-resistant (MRSA) and VRSA (vancomycin-resistant *S. aureus*) strains are among the global priorities listed by the WHO for research and development (R&D) of new antibiotics. (1) The genome sequencing allowed the identification of pathogen-specific enzymes and pathways, desirable targets for antimicrobial drug discovery. Among these pathways, the vitamin B6 (pyridoxal 5-phosphate) *de novo* synthesis pathway is an interesting example. (2) Pyridoxal 5-phosphate (PLP) is an essential cofactor for various enzymes in all organisms which are involved in the biosynthesis of amino compounds such as amino acids. A multimeric complex of two enzymes, Pdx1 and Pdx2, performs the synthesis. Although this enzymatic pathway has been widely studied, the assembling mechanism of Pdx1 and Pdx2 is unknown. (3) In this project, we propose to investigate the bacterial *S. aureus* PLP synthase complex by biophysical and structural analyses. Dynamic Light Scattering (DLS) and X-ray solution scattering (SAXS) analyses evidenced a salt dependency in SaPdx1 oligomerization. Crystals of SaPdx1 were obtained and X-ray diffraction data were collected at the new Manacá beamline (Sirius, Campinas) with a high-resolution of 2.6 Å and the structure is being refined. Both SaPdx1/SaPdx2 complex, wild type and mutant, were purified and the assembling was confirmed by SEC, DLS, and SDS-PAGE gels. The complex stoichiometries were quantitatively determined, for the first time, by SEC-SAXS analysis. Crystallization trials were carried out for both complexes and two conditions were selected for optimization by conventional methods and by XtalController technology. Two X-ray diffraction datasets were collected at PETRA III, DESY, Germany. One from wild type SaPdx1-2 complex with a resolution of 4 Å and the other from mutant SaPdx1-2 with 3 Å resolution. Both datasets are being processed using the autoPROC package.

Palavras-chave: *Staphylococcus aureus*. Protein crystallography. Dynamic light scattering.

Agência de fomento: FAPESP (2018/21213-6)

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Prioritization of pathogens to guide discovery, research and development of new antibiotics for drug-resistant bacterial infections, including tuberculosis.** Geneva: WHO, 2017.
- 2 DREBES, J. *et al.* MRSA infections: from classical treatment to suicide drugs. **Current Medicinal Chemistry**, v. 21, n. 15, p. 1809–1819, 2014.
- 3 BARRA, A. L. C. *et al.* Essential metabolic routes as a way to ESKAPE from antibiotic resistance.

Frontiers in Public Health, v. 8, n. 26, p. 1–8, 2020.

PG12

Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos

BARBOSA, Matheus Goulart; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla

matheusgb@ifsc.usp.br

Com a termodinâmica de buracos negros, iniciou-se um campo de estudos em gravitação no qual certas características dos chamados horizontes causais possuem uma correspondência direta com quantidades termodinâmicas. De modo geral, tais horizontes representam a fronteira que determina quais eventos no passado de um observador possuem uma relação causal com ele, sendo o horizonte de eventos de um buraco negro e o horizonte de Rindler exemplos típicos. Conforme esta relação entre horizontes causais e propriedades termodinâmicas se aprofundava e era apresentada em contextos mais gerais, surgiu a ideia de que teorias da gravitação, como a relatividade geral, poderiam ser descritas como consequência das leis da termodinâmica aplicadas ao espaço-tempo e seu conteúdo. (1) A fim de compreender melhor o quão genérica é esta conexão entre horizontes causais e termodinâmica no contexto da relatividade geral e avaliar a profundidade que ela tem na descrição de fenômenos gravitacionais, o foco deste projeto no atual estágio é estudar os fluxos de energia medidos por um observador genérico de um espaço-tempo. Para isso, é feita uma divisão 3+1 do espaço-tempo baseada nos cones de luz passados com vértices na linha de mundo do observador e se utiliza o formalismo de Bondi-Sachs para analisar o problema de forma similar à apresentada em. (2-3) Assim, pretende-se obter algum análogo à primeira lei da termodinâmica que forneça candidatos promissores para temperatura e entropia, podendo então estudar a viabilidade de estabelecer um análogo à segunda lei a partir de condições de energia e também procurar dar significado físico à temperatura encontrada utilizando uma análise semiclássica do problema.

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

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

Referências:

- 1 JACOBSON, T.; PARENTANI, R. Horizon entropy. **Foundations of Physics**, v. 33, n. 2, p. 323–348, Feb. 2003.
- 2 ISAACSON, R. A.; WELLING, J. S.; WINICOUR, J. Null cone computation of gravitational radiation. **Journal of Mathematical Physics**, v. 24, n. 7, p. 1824–1834, July 1983.
- 3 TAMBURINO, L. A.; WINICOUR, J. H. Gravitational fields in finite and conformal Bondi frames. **Physical Review**, v. 150, n. 4, p. 1039–1053, Oct. 1966.

PG13

Análise da inclusão de grupos periféricos na resposta óptica não linear em derivados de imidazo[4,5-b]piridina

OSPINA, Orlando Marbello; MENDONÇA, Cleber; VALVERDE, João Victor; BONI, Leonardo de; PELOSI, André; COCCA, Leandro Zucolotto; PIGUEL, Sandrine

omarbello@usp.br

A absorção de dois fótons é um fenômeno não linear que tem sido utilizado em diversos tipos de aplicações e dispositivos fotônicos, que incluem armazenamento óptico 3D, microscopia de fluorescência, limitação óptica e comutação óptica, para citar alguns. (1) Com o desenvolvimento da ciência dos materiais, foi possível sintetizar e explorar materiais com características que facilitam esse processo. Além disso, estudos anteriores mostram que as propriedades óticas não lineares do material e a seção de choque de absorção de dois fótons (2PA) aumentam com a conjugação eletrônica da molécula e com a presença de estruturas de carga simétricas e antissimétricas (estruturas push-pull). (1-2) Muitos trabalhos mostram que compostos orgânicos com estrutura eletrônica pi-conjugada têm grande eficácia em processos de absorção de multifótons. A imidazo[4,5-b]piridina é um grupo de compostos orgânicos heterocíclicos com estrutura química com características semelhantes às do material ativo de dois fótons. Além disso, essa molécula permite a incorporação de diferentes grupos periféricos. Assim, é possível explorar a relação entre a estrutura molecular com as propriedades eletrônicas e ópticas em função da configuração geométrica e a força de retirada ou liberação de elétrons (que é determinada pelo parâmetro de Hammett). (2-3) Por esta razão, a caracterização óptica de seis derivados de imidazo[4,5-b]piridina foi realizada utilizando a técnica Z-scan, assim como outras técnicas de espectroscopia óptica. Portanto, neste trabalho foi investigado a variação das propriedades fotofísicas e a resposta óptica não linear do material devido à adição de grupos periféricos que atuam como receptores e doadores de elétrons. Além disso, simulações estruturais e energéticas usando química quântica (Gaussian16) e o modelo teórico de soma de estados essenciais (SOS) foram aplicados para dar suporte aos resultados experimentais. Como resultado principal, verificou-se que as moléculas com uma maior conjugação eletrônica ou uma estrutura dipolar definida (D-pi-A ou A-pi-A) mostram uma melhor resposta nos processos de transferência de carga, assim como uma maior seção de choque de dois fótons.

Palavras-chave: Absorção de dois fotons. Compostos orgânicos. Propriedades óticas não lineares.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 ZHANG, Q. *et al.* Nonlinear optical response and two-photon biological applications of a new family of imidazole-pyrimidine derivatives. **Dyes and Pigments**, v. 126, p. 286–295, 2016.
- 2 BRENLLA, A. *et al.* Photoinduced proton and charge transfer in 2-(2'-Hydroxyphenyl) imidazo[4,5-b]pyridine. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 117, n. 3, p. 884–896, 2013.
- 3 PELOSI, A. G. *et al.* Influence of electron-withdrawing groups in two-photon absorption of

imidazopyridines derivatives. **Dye Pigment**, v. 198, 2022, DOI: 10.1016/j.dyepig.2021.109972.

PG14

Study of the relationship between two-photon absorption and dipolar properties in imidazo[1,2-a]pyridine derivatives

VALVERDE, João Victor; PELOSI, André Gasparotto; COCCA, Leandro Zucolotto; OSPINA, Orlando Marbello; PIGUEL, Sandrine; SILVA, Daniel Luiz da; BONI, Leonardo de; MENDONÇA, Cleber Renato

joaovalverde@ifsc.usp.br

Two-photon absorption (2PA) is a process in which two photons are simultaneously absorbed by a molecular system. (1) A notable feature of this phenomenon is that the rate at which electrons are promoted to excited states varies as the square of the photon flux. (2) Because of this, there have been several applications of two-photon absorption in photonics, such as two-photon fluorescence microscopy, optical memory, and optical power limiting. However, for such applications, the chromophore must have a reasonable nonlinear optical response. In general, there are two alternatives to obtain higher values of the 2PA cross-sections. (1) The first one is to increase the transition dipole moment from the ground state to excited states, as well as between excited states. The second alternative consists of increasing the permanent dipole moment difference between the ground state and the excited states. Such requirements are achieved by raising the effective conjugation of the molecule or adding peripheral groups with the characteristics of donating or withdrawing electrons. (3) In this context, the influence of different electron donating (OCH₃, and CH₃) and withdrawing (CN, and F) groups on the photophysical properties of imidazo[1,2-a]pyridine were studied, as well as the effect of these groups on the 2PA process. For this, some optical measurements were performed, such as linear absorption, fluorescence, fluorescence anisotropy, and solvatochromism, in addition to a theoretical study using quantum chemistry calculations. The 2PA cross-sections were obtained by the femtosecond tunable Z-scan technique. Our results are very promising and reveal a significant influence of peripheral groups on linear and nonlinear optical properties. Two-photon absorption cross-sections of about 14 GM were observed, which corresponds to an increase of approximately five times compared with the imidazo[1,2-a]pyridine core. This shows a possible path towards the architecture of chromophores with larger nonlinear linear responses.

Palavras-chave: Two-photon absorption. Photophysical properties. Organics molecules.

Agência de fomento: CAPES (88887.635789/2021-00)

Referências:

- 1 REBANE, A. *et al.* Relation between two-photon absorption and dipolar properties in a series of fluorenyl-based chromophores with electron donating or electron withdrawing substituents. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 115, n. 17, p. 4255–4262, 2011. DOI: 10.1021/jp200129h.
- 2 MCCLAIN, W. M.; HARRIS, R. A. **Two-photon molecular spectroscopy in liquids and gases**. New York: Academic Press, 1977.
- 3 DE BONI, L. MISOGUTI, L.; ZÍLIO, S. C.; MENDONÇA, C. R. Degenerate two-photon absorption spectra in azoaromatic compounds. **ChemPhysChem**, v. 6, n. 6, p. 1121–1125, 2005. DOI:

10.1002/cphc.200400391.

PG15

Investigação da discussão acerca da consistência termodinâmica de temperaturas negativas

INAGAKI, João Hiroyuki de Melo; BRITO, Frederico

jhiroyuki1@usp.br

O conceito de temperaturas absolutas negativas para determinados sistemas físicos existe há mais de 70 anos. O começo desta investigação se dá inicialmente a partir de sistemas de spins com população invertida, neste caso, devido a uma variação de campo magnético, o estado do sistema de spins é tal que sua entropia aumenta ao passo que a energia interna decresce, tendo sua descrição bem estabelecida por temperaturas negativas. (1) Nos últimos 10 anos, cresceu o interesse em investigar a consistência entre temperaturas negativas e termodinâmica e mecânica estatística usual, uma vez que uma das implicações de tais temperaturas é a realização de máquinas térmicas com eficiências maiores que de Carnot. Uma contribuição recente põe a validade de temperaturas negativas como um problema de definição da expressão fundamental da entropia no ensemble microcanônico. (2-3) É dito que a entropia termodinamicamente consistente é a entropia de Gibbs $S_G = \ln \Omega$ enquanto a entropia de Boltzmann, $S_B = \ln \omega$ não deve ser utilizada para descrições termodinâmicas. Aqui, Ω é a contagem de todos os estados com energia menor ou igual a E e ω é a densidade de estados para um dado valor de energia. Nosso trabalho, atualmente, foca em estudar este debate recente acerca da realização de temperaturas negativas. Ao longo do curso da pesquisa visamos descrever a termodinâmica de nanomáquinas a partir de uma análise quântica do universo, incluindo a descrição de temperaturas negativas.

Palavras-chave: Termodinâmica. Mecânica estatística. Entropia.

Agência de fomento: CAPES (88887.639583/2021-00)

Referências:

- 1 PURCELL, E. M.; POUND, R. V. A nuclear spin system at negative temperature. **Physical Review**, v. 81, p. 279–280, Jan. 1951.
- 2 DUNKEL, J.; HILBERT, S. Consistent thermostats forbids negative absolute temperatures. **Nature Physics**, v. 10, n. 1, p. 67–72, 2014.
- 3 HILBERT, S.; HÄNGGI, P.; DUNKEL, J. Thermodynamic laws in isolated systems. **Physical Review E**, v. 90, n. 6, p. 062116, Dec. 2014.

PG16

Numerical Challenges for Nonlinear Coupled Dipole Model

MOREIRA, Noel Araujo; BACHELARD, Romain

noel.araujo.moreira@gmail.com

Cold atoms is a flourishing research area where theory and experiments influence and guide the development of each other. In a previous article (1), we benchmarked our numerical results with experiments of Rubidium clouds pumped with a strong laser, reporting nonlinear effects in the atoms' reaction to the laser field. We relied on advanced numerical modeling to reproduce the experimental findings, but the full understanding of these nonlinear equations remains an open question. Our goal is to study the localization properties of the externally driven atomic sample by using the coupled-dipole model with nonlinear effects, which are a Mean-Field model of the full quantum model. This model takes into account the excited population of the atoms in the dynamics, through the operator σ^z , yet neglecting the quantum correlations between the particles. This allows us to get physical insights into many-body realizations of the atomic cloud, at a moderate computational cost. The current stage of the project aims to optimize all basic numerical aspects to get great performance and answer some unknown questions such as: what are the computational bottlenecks? What is the minimum number of realizations necessary to obtain statistically meaningful results? What are the best configurations to distribute tasks in parallel? All of these numerical details are crucial since, compared to the linear case, the set nonlinear differential equation is numerically more costly and presents convergence issues. On the other hand, being able to simulate very large systems is one of the greatest challenges in atomic physics, and in many other areas.

Palavras-chave: Coupled dipole model. Mean field. Optimization. High performance.

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

Referências:

1 CIPRIS, Ana *et al.* Subradiance with saturated atoms: Population enhancement of the long-lived states. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 126, n. 10, p.103604. Mar. 2021.

PG17

Estudo da complexidade emergente de modelos topológicos com base na entropia de *motifs* de redes

DOMINGUES, Guilherme Schimidt; COSTA, Luciano da F.

guilherme.domingues@usp.br

Muitos modelos são usados pela Ciência para descrever diferentes fenômenos da natureza ou para fazer previsões. Esses modelos variam no número de detalhes que abrangem, resultando em níveis de complexidade diferentes, implicando em previsões mais ou menos acuradas e demandando um maior ou menor custo de construção ou de operação. (1) Neste projeto propomos investigar a evolução da complexidade emergente de modelos topológicos de redes neurais, baseados na distribuição espacial de neurônios de configurações geométricas de complexidades incrementais, e também buscar responder perguntas sobre a relação entre a complexidade investida na construção do modelo e a sua complexidade resultante. (2) As complexidades estudadas podem ser calculadas através da entropia da distribuição de frequências dos *motifs* de cada rede, obtidos de forma estatística através da identificação de agrupamentos dos vértices da rede por semelhança, estimada através da medida de Semelhança por Coincidência. (3) Serão apresentados os modelos topológicos considerados, a abordagem para identificação de *motifs*, e as quantificações de complexidade topológica das redes obtidas.

Palavras-chave: Redes complexas. Complexidade. Redes neurais. Motif de rede.

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

Referências:

- 1 COSTA, L. da F.; DOMINGUES, G. S. **Quantifying complexity**. Disponível em: arXiv:1905.11925,2019. Acesso em: 21 de maio 2021.
- 2 KLUGER, J. **Simplicity: why simple things become complex (and how complex things can be made simple)**. Paris: Hachette Books, 2008.
- 3 DOMINGUES, G. S.; TOKUDA, E. K.; COSTA, L. da F. **City motifs as revealed by similarity between hierarchical features**. Disponível em: arXiv:2204.09104. Acesso em: 24 de agosto de 2022.

PG18

Inkjet-printed complementary inverters based on Organic Electrochemical Transistors

LUGINIESKI, Marcos; FARIA, Gregório

mluginieski@ifsc.usp.br

Inkjet-printed complementary inverters based on Organic Electrochemical Transistors (OECT) are the device of choice for building logical, sophisticated and smart electronic devices. Typically, a complementary inverter comprises a n-type and a p-type transistor. While p-type organic transistors are already well established in the literature, n-type devices still face a lack of publications and studies due to its poor stability and electronic conductivity. (1) Therefore, to achieve logical, sophisticated and smart devices, these challenges must be overcome. Among them, this project will investigate the mechanisms of operation of these devices, the physics of the interfaces involved, stability and optimization. Particularly, the OECTs operation is based on electrochemical doping of the organic semiconductor by ionic species coming from electrolyte. The volumetric capacitance (C^*) is the fundamental physical parameter that gives information about this phenomenon. Usually, C^* is extracted with Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) in a capacitor-like structure. Recent studies, however, have reported a pulsed voltage technique for calculating impedances parameter, directly from the transistor structure (three terminal device). (2) Therefore, the first goal of this project is to confront these two correlated, yet, completely different techniques for characterizing OECTs. The materials choice for the OECTs here in explored are: P3HT, PBTTT, PTB7-Th and PEDOT:PSS as p-type and P (NDI2OD-T2) and NDI-2Tz as n-type organic semiconductors. As for the electrolytes, standard aqueous 100 mM KCl solution shall be used. This topic is quite recent in the literature and, therefore, its study constitutes opportunities to contribute to the understanding of fundamental aspects of the area, as well as the possibility of publications with high scientific and technological impact.

Palavras-chave: Organic electrochemical transistors. Volumetric capacitance. Electrochemical impedance spectroscopy.

Agência de fomento: CAPES (88887.670919/2022-00)

Referências:

- 1 SUN, H.; GERASIMOV, J.; BERGGREN, M.; FABIANO, S. N-Type organic electrochemical transistors: materials and challenges. **Journal Of Materials Chemistry C**, v. 6, n. 44, p. 11778-11784, 2018.
- 2 FARIA, G. C.; DUONG, D. T.; SALLEO, A. On the transient response of organic electrochemical transistors. **Organic Electronics**, v. 45, p. 215-221, June 2017.

PG19

Synthesis of optimal unitary transformations for the study of quantum complexity

MORAZOTTI, Nicolas André da Costa; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus

nicolas.morazotti@gmail.com

A quantum system perturbed by the environment is prone to errors. The existence of the environment itself implies that any given eigenstate of a pure Hamiltonian rapidly decays, hampering the information storage and processing in quantum computers. We wish to minimize errors by performing the most efficient synthesis of a given evolution. An important concept to achieve this goal is *quantum complexity*, understood as a metric of how hard it is to synthesize a given evolution. In general, the quantum complexity of a system is the amount of gates, from a given set of universal gates, needed to produce some unitary transformation. We make use, however, of differential geometry, and the definition of complexity changes to the length of the geodesic linking the identity of the system to the unitary evolution of interest. (1) To this date, some authors (2-3) have shown the possibility of implementing some recurrent neural network architectures capable of predicting the sequences of controls in order to synthesize the desired unitary. We aim to improve on said references by adding noise to the steered Hamiltonian. In order to do so, we model noise as a non-controllable drift Hamiltonian, purifying the system by adding one ancillary qubit for each other qubit of interest. We hope that, once this is clear, we may be able to compare these results with the usual dynamical decoupling methods. We speculate that the control of our method has a smooth evolution over time, whereas the dynamical decoupling method needs rapid manipulation of instantaneous pulses.

Palavras-chave: Quantum complexity. Quantum control theory. Machine learning.

Agência de fomento: CAPES (88887.339588/2019-00)

Referências:

- 1 NIELSEN, M. A. *et al.* Quantum computation as geometry. **Science**, v. 311, n. 5764, p. 1133–1135, 2006. DOI: 10.1126/science.1121541
- 2 SWADDLE, M. *et al.* Generating three-qubit quantum circuits with neural networks. **Physics Letters A**, v. 381, n. 39, p. 3391–3395, 2017. DOI: 10.1016/j.physleta.2017.08.043
- 3 PERRIER, E.; TAO, D.; FERRIE, C. Quantum geometric machine learning for quantum circuits and control. **New Journal of Physics**, v. 22, n. 10, p. 103056, 2020. DOI: 10.1088/1367-2630/abbf6b

PG20

Synthesis of Niobium Phosphate Glasses and Structural Characterization by Solid State NMR

ENSUNCHO, Laureano; BRADTMULLER, Henrik; ECKERT, Hellmut

laureanoensuncho@usp.br

Phosphate glasses are used in a wide range of applications such as optical communications, three-dimensional displays, optical switching devices and solid lasers owing to their high solubility with active metal ions. (1) The incorporation of transition metal ions, such as Nb_2O_5 , not only improves the chemical durability of phosphate glasses, but also significantly contributes to increase both their linear and non-linear indexes of refraction. (2) As a result, they were hence proposed as host matrix of rare-earth elements for optical applications. However, a fundamental understanding about the structural role of niobium, which can serve as a network modifier or as a network former, into these glasses has not been achieved. Solid-state nuclear magnetic resonance (NMR) has been proven to be a powerful tool in addressing structural elucidation, especially for disordered materials, due to its well-proven ability to provide structural information. (1) In this context and as a first step, we synthesize and study glasses in the ternary system $\text{Na}_2\text{O} - \text{Nb}_2\text{O}_5 - \text{P}_2\text{O}_5$ from two compositional series through advanced multinuclear NMR experiments with the aim to obtain new structural insights towards the development of new structure-function correlations. While the NMR of ^{31}P and ^{23}Na is relatively straightforward, the nuclear isotope ^{93}Nb poses significant challenges owing to its large nuclear electric quadrupole moment, resulting in excessive line broadening and resolution. These challenges can be addressed by new single and double resonance techniques involving various wideband excitation and dipolar recoupling technique. (3) An important objective of the project will be the development of a generally applicable magnetic resonance strategy that can be extended to other quadrupolar nuclei with similar characteristics, such as ^{25}Mg , ^{45}Sc , ^{47}Ti , and $^{69/71}\text{Ga}$, and ^{139}La , featuring similar spin dynamics.

Palavras-chave: Phosphate glasses. Niobium oxide. NMR.

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

Referências:

- 1 ZHANG, R. *et al.* Structural studies of $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{NaPO}_3$ glasses by solid state nuclear magnetic resonance and x-ray photoelectron spectroscopy. **Journal of Physical Chemistry**, v. 121, n. 18, p. 10087–10094, 2017.
- 2 KOUDELKA, L. *et al.* Structure and properties of barium niobophosphate glasses. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 459, p. 68-74. 2017.
- 3 KOPPE, J. *et al.* Minimizing lineshape distortions in static ultra-wideline nuclear magnetic resonance of half-integer spin quadrupolar nuclei. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 124, n. 21, p. 4314-4321, 2020.

PG21

Probing the singularities of the Landau-gauge gluon and ghost propagators with rational approximants

BOITO, Diogo; CUCCHIERI, Attilio; LONDON, Cristiane Yumi Mise; MENDES, Tereza

cristiane.london@usp.br

Padé approximants are employed in order to study the analytic structure of the four-dimensional SU(2) Landau-gauge gluon and ghost propagators in the infrared regime. The approximants, which are model independent, are used as fitting functions to lattice data for the propagators (1-2), carefully propagating uncertainties due to the fit procedure taking into account all possible correlations. Applying this procedure systematically to the gluon propagator data, we observe the presence of a pair of complex poles at $p_{\text{pole}}^2 = (-0.37 \pm 0.05_{\text{stat}} \pm 0.08_{\text{sys}}) \pm i(0.66 \pm 0.03_{\text{stat}} \pm 0.02_{\text{sys}}) \text{ GeV}^2$, where the first error is statistical and the second systematic, and also a zero at the negative real axis of p^2 , at $p_{\text{zero}}^2 = (-2.9 \pm 0.4_{\text{stat}} \pm 0.9_{\text{sys}}) \text{ GeV}^2$. For the ghost propagator, the Padés indicate the existence of the single pole at $p^2 = 0$, as expected. D-Log Padés, which are useful to study functions with branch cuts, were also applied to the ghost propagator and we found evidence of a cut on the negative real axis at $p_c = (-0.12 \pm 0.08_{\text{stat}} \pm 0.02_{\text{sys}}) \text{ GeV}^2$. The presence of the pair of complex poles in the gluon propagator, already hinted upon in previous works (3), is now put into a more firm basis thanks to the model independence and careful error propagation of our procedure.

Palavras-chave: Gluon propagator. Ghost propagator. Padé approximants.

Agência de fomento: FAPESP (2020/15532-1)

Referências:

- 1 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Constraints on the IR behavior of the gluon propagator in Yang-Mills theories. **Physical Review Letters**, v. 100, p. 241601, 2008.
- 2 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Constraints on the IR behavior of the ghost propagator in Yang-Mills theories. **Physical Review D**, v. 78, p. 094503, 2008.
- 3 FALCÃO, A. F.; OLIVEIRA, O.; SILVA, P. J. Analytic structure of the lattice Landau gauge gluon and ghost propagators. **Physical Review D**, v. 102, p. 114518, 2020.

PG22

Microambientes 3D e seu uso no cultivo de bactérias probióticas

OTUKA, Adriano J. G.; OLIVEIRA, Analú B. de; FONTANA, Carla R.; MENDONÇA, Cleber R.; MORAES, Jonathas Q. R.

jonathas.moraes@usp.br

Bactérias dos gêneros *Lactobacillus* e *Bifidobacterium* são comumente encontradas na microbiota intestinal humana, sendo consideradas probióticas por serem microorganismos que afetam positivamente o sistema imunológico do seu hospedeiro. (1) O consumo de cepas específicas de probióticos tem demonstrado efeitos benéficos que amenizam diversas condições médicas, como câncer de cólon, alterações colesterolêmicas e Alzheimer, por exemplo. (1-2) Eventualmente, essas bactérias formam um biofilme, estrutura extracelular amorfa composta de proteínas, lipídeos, oligossacarídeos e DNA, que age como uma camada protetora, contribuindo para a sobrevivência do conjunto de indivíduos. (3) É interessante, portanto, conhecer e caracterizar a formação de biofilmes em bactérias probióticas, com vistas a propor mecanismos de entrega mais eficientes. Propõe-se a aplicação da técnica de polimerização via absorção de dois fótons (P2F) para criar estruturas tridimensionais em escala microscópica que permitam a análise quantitativa, e não apenas qualitativa, do desenvolvimento dessas bactérias *in vitro*. A absorção de dois fótons (A2F) é um comportamento único da matéria em face a campos elétricos de altas intensidades, que provocam esse processo óptico não linear de forma espacialmente localizada, conferindo elevada resolução espacial para a técnica de P2F. Nesse trabalho utilizamos um laser Ti:safira, centrado em 780 nm, com largura de banda de 50 nm e pulsos de 100 fs a uma taxa de repetição de 86 MHz para induzir o processo de A2F em uma molécula fotossensível. A excitação do composto promove a geração de radicais livres responsáveis por induzir a polimerização de resinas acrílicas, dando origem aos microambientes de interesse. Foram fabricadas estruturas tridimensionais com distintas disposições espaciais, de modo a avaliar não apenas a biocompatibilidade das mesmas, mas especialmente o efeito que determinadas geometrias têm sobre o desenvolvimento de um de bactérias probióticas composto por *Lactobacillus acidophilus*, *L. rhamnosus*, *L. paracasei* e *Bifidobacterium lactis*.

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

Agência de fomento: FAPESP (2020/15736-6)

Referências:

- 1 SAAD, S. M. I. Probióticos e prebióticos: o estado da arte. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 42, n. 1, p. 1-16, 2006. DOI: 10.1590/S1516-93322006000100002.
- 2 AKBARI, E. *et al.* Effect of probiotic supplementation on cognitive function and metabolic status in Alzheimer's disease: a randomized, double-blind and controlled trial. **Frontiers in Aging Neuroscience**, v. 8, p. 256-1-256-8, 2016. DOI: 10.3389/fnagi.2016.00256.
- 3 DONLAN, R. M. Biofilms: microbial life on surfaces. **Emerging Infectious Diseases**, v. 8, n. 9, p.

881-890, 2002. DOI: 10.3201/eid0809.020063.

PG23

Combinação de antibiótico com inativação fotodinâmica para o tratamento de infecções bacterianas

SOARES, Jennifer Machado; GUIMARAES, Francisco Eduardo Gontijo; BAGNATO, Vanderlei Salvador; BLANCO, Kate Cristina

jennifer.soares@usp.br

Alternativas para a falha de antibiótico em infecções por bactéria resistentes é um dos principais desafios de saúde global. (1) A presença de espécies reativa de oxigênio pode potencializar a ação antimicrobiana de antibióticos em cepas sensíveis e resistentes. (2) Todavia, a combinação de terapias como a antibioticoterapia e a inativação fotodinâmica não é trivial devido aos diversos parâmetros, os quais podem modular a resposta em efeitos sinérgicos e antagônicos. (3) O objetivo deste estudo é potencializar a ação antimicrobiana de antibióticos em cepas sensíveis e resistentes na presença de espécies reativas de oxigênio. Protocolos de subdose de inativação fotodinâmica combinados com antibiótico foram avaliados. Nós demonstramos que a dinâmica de interação entre a bactéria *Staphylococcus aureus* com a curcumina como fotossensibilizador e os antibióticos amoxicilina, eritromicina e gentamicina é dependente da ordem de aplicação das terapias. Além disso, a interação entre as terapias afeta a atividade metabólicas e as ligações das biomoléculas da superfície celular bacteriana. Como resultados da potencialização do antibiótico pela inativação fotodinâmica, os grupos combinados apresentam redução bacteriana superior as monoterapias. Essa demonstração evidencia a capacidade da combinação de terapias como estratégia para o combate de infecções de bactéria resistentes a antibióticos.

Palavras-chave: Sinergismo. Inativação fotodinâmica. Antibioticoterapia.

Agência de fomento: CAPES (88887.372091/2019-00)

Referências:

- 1 ABAT, C. *et al.* Evaluating the clinical burden and mortality attributable to antibiotic resistance: the disparity of empirical data and simple model estimations. **Clinical Infectious Diseases**, v. 65, suppl_1, p. S58-S63, 2017.
- 2 MAISCH, T. A new strategy to destroy antibiotic resistant microorganisms: antimicrobial photodynamic treatment. **Mini Reviews in Medicinal Chemistry**, v. 9, n. 8, p. 974-983, 2009.
- 3 WOZNIAK, A. *et al.* Combined antimicrobial activity of photodynamic inactivation and antimicrobials—state of the art. **Frontiers in Microbiology**, v. 9, p. 930, 2018.

PG24

BEC with dipolar interaction in a shell

BERETA, Sálvio; SANTARELLI, Monica Andriolli Caracanhas

salviojacobbereta@yahoo.com.br

The Bose-Einstein condensate was initially predicted by Einstein using the Satyendra Nath-Bose calculus statistic. The goal of the project is to study the BEC considering the dipole-dipole magnetic interaction and a harmonic (or anharmonic) displaced oscillator (1). The BEC in the shell with dipole make the particles go to the equator of the sphere. The goal of the study is to add angular moment to study the dynamic of the vortices (2) in this type of dipolar BEC. However, there is no vortices yet, I am working on it.

Palavras-chave: BEC. Dipolar. Shell.

Agência de fomento: CAPES (88887.505539/2020-00)

Referências:

1 KUMAR, R. K. *et al.*. Fortran and C programs for the time-dependent dipolar; **Computer Physics Communications**, v. 195, p.117-128, Oct.2015.

2 EBERLEIN, C.; GIOVANAZZI, S.; DUNCAN, O'Dell, J. Exact solution of the Thomas-Fermi equation for a trapped Bose-Einstein condensate with dipole-dipole interactions; **Physical Review A** v. 71, p.033618, Mar.2005.

PG25

Degradação de polissacarídeos de biofilmes de *S. mutans* por α -1,3 (PmGH87) e α -1,6 (CoGH66) glucanases

CORTEZ, Anelyse; POLIKARPOV, Igor; QUEIROZ, Mateus Xavier de; SOUSA, Andrei Nicoli Gebieluca Dabul Dias de; PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi; PRATAVIEIRA, Sebastião; RICOMINI FILHO, Antonio Pedro

anelysecortez@hotmail.com

Placas dentais são biofilmes bacterianos geralmente formados por bactérias do gênero *Streptococci* que crescem sobre a superfície dos dentes e podem culminar no desenvolvimento de cáries. (1) Nos biofilmes, as células microbianas estão envoltas por uma matriz polimérica complexa, cuja finalidade é a proteção das células contra possíveis agentes nocivos como, por exemplo, os antibióticos. Essa matriz é comumente formada por proteínas, DNA extracelular e polissacarídeos extracelulares (PEC). (2) Sabe-se que biofilmes dentais apresentam PECs com ligações glicosídicas α -1,3 e α -1,6. Dessa forma, a utilização de enzimas ativas em carboidratos complexos, como α -1,3 (*Pm* GH87) e α -1,6 (*Co* GH66) glucanases, pode ser uma estratégia para o controle do biofilme dental. Neste trabalho, realizamos um estudo piloto para avaliar a atividade de glucanases na degradação de PEC e consequente redução de biomassa de biofilmes de *S. mutans*. Biofilmes de *S. mutans* UA159 foram formados por 24 h em microplacas usando meio UTEYB + 1% sacarose. Em seguida, foram submetidos a tratamento enzimático com PmGH87 ou CoGH66 a 37 °C por diferentes tempos de incubação, na concentração enzimática de 1 mg/ml. As enzimas foram diluídas em tampão PBS 1X, e somente PBS 1X foi considerado controle. A combinação das enzimas para avaliar se existe efeito sinérgico também foi avaliada. Para a quantificação da biomassa total, os biofilmes foram corados com cristal violeta 0.05%, lavados com água e o corante restante foi recuperado com ácido acético 30%, tendo a absorbância medida a 570 nm. Para quantificar os PECs, os mesmos foram extraídos dos biofilmes com NaOH 1 M sob agitação da microplaca por 15 min, transferidos para microtubos, centrifugados e o sobrenadante foi precipitado com etanol. Depois, foram quantificados colorimetricamente pelo método fenol-sulfúrico, sendo medidos a 490 nm. A % de redução de biomassa e PEC foi calculada para cada grupo de tratamento em relação ao controle. Para obter imagens qualitativas, realizou-se microscopia de varredura confocal, onde os corantes Dextran, Alexa Fluor 647 e Syto-9 foram utilizados para corar a matriz polimérica e as células bacterianas, respectivamente. A % de redução de biomassa (B) e PEC (P) para ambas as enzimas mostrou um comportamento tempo-dependente, com máxima redução de $92 \pm 0.7\%$ (B) e $99.3 \pm 0.4\%$ (P) para a enzima *Pm* GH87; e $85.7 \pm 0.9\%$ (B) e $99.4 \pm 0.03\%$ (P) para a enzima *Co* GH66, após 24 h de tratamento. A combinação das enzimas resultou em um efeito sinérgico, onde após apenas 2 h de tratamento observou-se $93.8 \pm 0.6\%$ de redução de biomassa e $99 \pm 0.2\%$ de redução de PEC, na dose enzimática total de 1 mg/ml. As imagens de microscopia confocal confirmaram os dados quantitativos, indicando considerável redução de biomassa e polissacarídeos extracelulares após tratamento combinado das enzimas. Em conclusão, os dados sugerem que ambas as enzimas são capazes de degradar PEC e diminuir a biomassa total de biofilmes de *S. mutans*, e a ação conjunta das duas diminui o tempo de tratamento, indicando efeito sinérgico.

Palavras-chave: Biofilme dental. Enzimas. Sinergismo.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 JAKUBOVICS, N. S. *et al.* The dental Plaque biofilm matrix. **Periodontology** v. 86, n,p.32–56. 2021.
- 2 LIN, Y.;ZHOU, X.; LI, Y. Strategies for streptococcus mutans biofilm dispersal through extracellularp polymeric substances disruption. **Molecular Oral Microbiology** v. 37, n.,p.1–8, 2022.

PG26

Amplificative–dissipative tunneling: the Problem of genetic mutation

ARAUJO, Hugo Sanchez de; MOUSSA, Miled Hassan Youssef

hugo.sanchezdearaujo@gmail.com

Genetic mutations are one of the most important topics to understand both adaptive changes to preserve species and relevant aspects in the genetic code that lead from genetic syndromes to cancers. (1) The occurrence of mutations is connected with proton transfer between hydrogen bonds, leading to tautomerism inside DNA molecule. (2) Here we present an extended spin–boson open quantum system model which is able to encompass all the probabilistic regimes of occurrence of genetic mutations. (3) In our model, an H–bond proton interacts with two counteracting baths: an attenuating reservoir describing the nucleus environment and an amplifying anti–reservoir accounting for external sources of radiation. In addition to dissipation that is known to attenuate the proton tunneling probability to protect the DNA strands, we take into account amplification sources of radiation that naturally raises the tunneling rate.

Palavras-chave: Genetic mutations. Tautomerism. Spin-Boson model.

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

Referências:

- 1 NELSON, L.; COX, M. M.; LEHNINGER, A. L. **Principles of biochemistry**. 7th ed. New York: W.H. Freeman, 2017.
- 2 LODISH, H. F. **Molecular cell biology**. 4th ed. New York: W.H. Freeman, 2000.
- 3 LEGGETT, A. J. *et al.* Dynamics of the dissipative two-state system **Review of Modern Physics**, v. 59, n. 1, Jan 1987.

PG27

Classificação de minérios de ferro

QUEIROZ, Alfredo Exposito de; ANDRADE, Marcelo Barbosa de

alfredo.queiroz@usp.br

O minério de ferro brasileiro tem atendido as altas demandas de siderúrgicas internacionais, que tem crescido recentemente. No último ano, o país obteve uma receita da ordem de dezenas de bilhões de dólares com a exportação de minério de ferro. (1) Essas altas demandas influenciam na procura de novos depósitos de minérios de ferro e no desenvolvimento de novas técnicas mais rápidas para identificar e caracterizar os minerais. As técnicas tem que considerar a variação de composição e polimorfismo estrutural, como ocorre nos minérios hematita, magnetita, goethita e outros. (2) O exemplo é a hematita (Fe_2O_3), maghemita ($(\text{Fe}_{0.67}^{3+}\square_{0.33})\text{Fe}_2^{3+}\text{O}_4$) e magnetita ($\text{Fe}^{2+}\text{Fe}_2^{3+}\text{O}_4$): as duas primeiras possuem composição química semelhante, mas possuem estruturas cristalinas diferentes. Ao contrário da magnetita e maghemita que possuem a mesma estrutura cristalina. Neste trabalho, utilizaram-se os métodos de aprendizado de máquina supervisionados para a classificação de espécies minerais a partir de dados coletados por espectroscopia Raman uma vez que os óxidos de ferro apresentam modos vibracionais Raman que são sensíveis a alterações estruturais e de composição química. (3) O trabalho focou-se em redes neurais artificiais e vizinhos próximos para classificar os minerais através dos respectivos deslocamentos Raman observados nos espectros. A associação da espectroscopia Raman com o aprendizado de máquina poderá ser de grande assistência e valor para os processos de exploração.

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

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

Referências:

- 1 MINERIO de ferro: qual a sua importancia para a economia? Disponível em: <https://exame.com/invest/guia/minerio-de-ferro-qual-a-sua-importancia-para-a-economia/>. Acesso em: 25 agosto 2022.
- 2 TUČEK, J. *et al.* Zeta- Fe_2O_3 – a new stable polymorph in iron(III) oxide family. **Scientific Reports**, v.5, p. 1-11, 2015. DOI: 10.1038/srep15091.
- 3 FARIA. L.; SILVA. S.V.; OLIVEIRA, M. T. Raman microspectroscopy of some iron oxides and oxyhydroxides. **Journal of Raman Spectroscopy**, v.28, p.873-878, 1997.DOI: 10.1002/(SICI)1097-4555(199711).

PG28

Propagadores de quark no calibre de Coulomb a partir da QCD na rede

LEAL JUNIOR, Jesuel Marques; SKULLERUD, Jon-Ivar; SILVA, Paulo; KALUSCHE, Gerhard

jesuel.leal@usp.br

Os propagadores do quark, funções de correlação entre os graus de liberdade fermiônicos da cromodinâmica quântica (QCD), podem conter informações relevantes para o estudo de fenômenos não-perturbativos da QCD (1), tais como o confinamento, que é o nome que se dá ao fato das partículas fundamentais dessa teoria não serem observadas livres, e a quebra espontânea de simetria quiral, mecanismo pelo qual os estados ligados de quarks adquirem a maior parte de sua massa. Propagadores também são necessários para o cálculo do vértice de quarks e glúons. Tal vértice descreve as interações entre as partículas fundamentais da teoria. Apresentamos resultados preliminares para o propagador de quark no calibre de Coulomb calculados em uma simulação de QCD na rede, um dos métodos mais robustos para estudo do regime não-perturbativo dessa teoria. (2) A escolha pelo calibre de Coulomb se mostra conveniente pelo tipo de rede que utilizamos, e também pelo contraste que pode proporcionar frente a resultados obtidos no calibre de Landau (3), que costuma ser a escolha usual para estudos de funções de correlação. Os resultados apresentados foram obtidos no âmbito de um projeto para o cálculo do vértice quark-glúon à temperatura finita.

Palavras-chave: Teoria quântica de campo. QCD. QCD na rede. Propagador de quark.

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

Referências:

- 1 VANDERSICKEL, N.; ZWANZIGER, D. The Gribov problem and QCD dynamics. **Physics Reports**.v. 520, n.4,p. 175–251,2012.
- 2 GATtringer, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice**. New York: Springer, 2010.
- 3 SKULLERUD, J; L.; ILLIAMS, A. G. Quark propagator in Landau gauge, **Physical Review D**, v. 63,p.054508, 2001.

PG29

Bose-Einstein condensates and the thin-shell limit in anisotropic bubble traps.

BIRAL, Elias; SANTOS, Francisco Ednilson Alves dos

eliasbiral@usp.br

The Bose-Einstein condensate (BEC) have been a hot topic since Eric A. Cornell and C. E. Wieman (1) were able to experimentally achieve them in 1995 with confined alkaline gases of 87Rb atoms. Since then, with the fairly recent growing use of cold atoms to design BEC, many different theoretical models and experimental setups have appeared in the literature. In particular, the bubble trap shaped potential has been of great interest in the last 20 years, due to its fairly easy experimental manipulation. Inspired by the recent scientific developments in this field (2), in this work we study the anisotropic bubble trap physics in the thin-shell limit relating the physical parameters of the system with the geometry of the manifold in question, in which we believe to be a very original approach. Firstly, the mathematical background in which our theory is placed is defined and explained, considering the Gaussian Normal Coordinate System (GNCS). This system is well known and allows for a better description of the physics involved, granting a fairly simple understanding of the calculations. Then our main ideas are exposed, where the general potential in which our work is valid is defined with the aid of a parameter Λ which is used to reach the thin-shell limit as it goes to infinity. It turns out that the usual naive approach for taking the thin-shell limit leads to infinite answers when anisotropic shells are considered. Therefore, in order for us to have a consistent theory, it was necessary to consider regularized infinitesimal anisotropies. The radial oscillation frequency is calculated considering such potential, and a rigorous definition of the thin-shell limit is obtained considering the geometrical distortion of the bubble trap, in order to provide a more sophisticated mathematical description. We chose to work with one experimental potential as a particular example. Next, some physical quantities such as the general potential V , the particle interaction g_{INT} , and the main system Hamiltonian H are manipulated considering expansions in Λ . Non degenerate time-independent perturbation theory is applied to find the energies in question and an effective Hamiltonian is defined. Finally, this Hamiltonian is solved and analyzed in the final chapter regarding perturbative solutions in ϵ for both the ground-state wavefunction and oscillation frequencies of the system with the aid of the Bogoliubov theory.(3)

Palavras-chave: Bose-Einstein condensates. Thin-shell limit. Bubble trap.**Agência de fomento:** CNPq (140657/2017-7)**Referências:**

- 1 ANDERSON, M. H. *et al.* Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995.
- 2 MÖLLER, N. S, *et al* ; Bose-Einstein condensation on curved manifolds, *New Journal of Physics*, v. 22, n. 6, p. 063059, 2020.

3 PETHICK, C. J.; SMITH, H. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. 2nd. ed. New York: Cambridge University Press, 2008. 569 p.

PG30

Rapidly rotating condensates in a Bubble Trap

TOMISHIYO, Guilherme; SANTARELLI, Monica Caranhas

tomishiyo@gmail.com

We study a rotating Bose-Einstein Condensate (BEC) trapped in a shifted harmonic oscillator and Mexican Hat trap, which approximates the potential of a bubble trap potential in some situations. We determined the vortices configurations that appears in this system by varying the interaction and angular momentum of the atomic cloud. The system phase diagram has the macrovortex configurations for small values of the interaction parameter. The charge of the central vortex increases with increasing rotation. Higher values of the atomic interaction turns the macrovortex unstable. It decays into multiple single-charged vortices that arrange themselves in a lattice. Since the vortices are not always visible in the absorption images (1), we look for alternative methods to characterize the vortex configuration. More specifically, we search for experimental signatures to determine the transitions in the phase diagram. For that, we study how it affects the collective modes of the condensate. The splitting of the modes degenerescence can be seen as an indirect signature of the presence of the vortices in the trapped BEC.

Palavras-chave: Física atômica. BEC. Gases ultrafrios.

Agência de fomento: CNPq (140663/2018-5)

Referências:

1 ABO-SHAEER, J. *et al.* Observation of vortex lattices in Bose-Einstein condensates. **Science**, v.292, p.476-479, April 2001.

PG31

Algoritmo quântico para solução de equações diferenciais lineares

MACIEL, Matheus Dias; BRITO, Frederico Borges de

matdias.maciell@usp.br

A computação quântica é o paradigma da computação cujas operações utilizam-se de fenômenos da mecânica quântica como superposição, interferência e emaranhamento. O principal modelo utilizado para o desenvolvimento de algoritmos quânticos é o dos circuitos quânticos. Os computadores quânticos teoricamente podem resolver certos problemas com complexidade temporal significativamente inferior aos computadores clássicos. Um exemplo disso trata-se da fatoração de números inteiros, problema resolvido pelo algoritmo de Shor com uma melhora exponencial em complexidade comparado com os melhores algoritmos clássicos. A evolução dos hardwares quânticos impulsiona o desenvolvimento de algoritmos quânticos que possam alcançar vantagem em termos de complexidade de tempo. Como isto trata-se de uma atividade não trivial, o desenvolvimento de novas heurísticas para propor algoritmos quânticos é um campo ativo de pesquisa. Este trabalho analisará um algoritmo inspirado em (1) que forneceu uma aceleração exponencial comparado com métodos clássicos, e alcançou peculiaridades que podem ser consideradas vantagens com relação a outros algoritmos quânticos. Também busca-se desenvolver novos algoritmos utilizando outras técnicas de Quantum Operations para a resolução de LDEs homogêneas. Tendo em vista que estas técnicas são majoritariamente utilizadas para modelar sistemas quânticos abertos e a perda de informação em canais quânticos ruidosos (2), tem-se a emergência de um novo paradigma para construção de algoritmos. O objetivo deste projeto trata-se de desenvolver os algoritmos quânticos descritos acima e as demonstrações matemáticas que descrevam as suas principais propriedades. Também serão elaboradas simulações com alguns qubits através de frameworks de simulação de algoritmos quânticos como o Qiskit e executar esses algoritmos em dispositivos quânticos ruidosos reais através das ferramentas disponíveis. Por fim este trabalho também busca levantar à discussão da comunidade a proposta de novos algoritmos quânticos baseados em sistemas quânticos abertos e que isto pode abrir novas possibilidades na era NISQ (Noisy Intermediate-scale Quantum) ou à longo prazo.

Palavras-chave: Computação quântica. Algoritmos quânticos. Sistemas quânticos abertos. Equações diferenciais lineares.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ROMEIRO, J. H.; DE BRITO, F. B. **Quantum amplitude damping for solving homogeneous linear differential equations: a non-interferometric algorithm.** Disponível em: arXiv: 2111.05646, 2021. Acesso em: 30.08.22.
- 2 NIELSEN, M.I A.; CHUANG, I. **Quantum computation and quantum information**, Cambridge:

Cambridge University Press, 2000.

PG32

A dependência temporal da descoerência de um qubit por ruído de fase: cálculos analíticos das soluções exatas e da equação mestra

MOTTA, Octávio da

octavioemotta@gmail.com

Abordaremos o ruído de fase através do modelo de spin e bóson (1), com uma densidade espectral do banho bosônico ôhmica. (2) O cálculo da descoerência de um qubit de memória será feito analiticamente para obtermos a solução exata do sistema global, incluindo o qubit e o banho, através da resolução da equação de Schrödinger para a hamiltoniana do modelo. Também será feito o cálculo analítico da solução da equação mestra não markoviana, que é uma equação íntegro diferencial. Reproduzimos cálculos preliminares de nossa equipe, nos quais observamos que estas respostas são idênticas, embora não sabemos a razão, já que a equação mestra é uma aproximação de segunda ordem nas constantes de acoplamento. O objetivo deste mestrado tem duas partes. A primeira é encontrar a resposta para a razão da coincidência entre a solução exata e a da equação mestra para a descoerência como função do tempo do qubit. A segunda parte consiste em entender se é ou não possível obter a proteção contra o ruído para um qubit de memória, dentro do contexto do procedimento de desacoplamento dinâmico contínuo, muito estudado em nosso grupo, mas no limite em que o ruído se torna markoviano.

Palavras-chave: Informação quântica. Descoerência. Qubit.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 CALDEIRA, A. O.; LEGGETT, A. J. Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems. **Physical Review Letters**, v. 46, n. 4, p. 211-214, 1981.
- 2 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum computation and quantum information** . 10th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.

PG33

Inativação Fotodinâmica do *Rhizopus oryzae* – Estudo in vitro

MARQUES, Maria Júlia de Arruda Mazzotti; ALVES, Fernanda; GUIMARAES, Francisco Eduardo; KURACHI, Cristina

maria.julia.marques@usp.br

Durante a pandemia da COVID-19, várias complicações surgiram em pacientes infectados, sendo uma delas a mucormicose, que é uma doença fúngica extremamente agressiva que possui uma elevada taxa de mortalidade, especialmente em doentes com sistema imune comprometido. A maioria dos casos de mucormicose é causada pelo fungo *Rhizopus oryzae*, também conhecido como fungo negro, com 90% dos casos afetando a região rino cerebral. Os tratamentos utilizados são baseados em doses elevadas de anfotericina B e posaconazol, associadas a ressecções cirúrgicas quando possível. Contudo, mesmo com um tratamento antifúngico agressivo, a taxa de mortalidade é elevada. (1) Na ausência de desbridamento cirúrgico do tecido infectado, o tratamento antifúngico por si só não é curativo. Por isso há uma necessidade de se desenvolver tratamentos alternativos. A Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana (TFDa) pode ser uma opção terapêutica alternativa para a mucormicose. (2) Devido à falta de relatos sobre a inativação fotodinâmica de *R. oryzae*, investigamos diferentes protocolos utilizando o Photodithazine® (PDZ) como um fotossensibilizador. Foi estudada a resposta sobre a taxa de crescimento do fungo sob parâmetros de tratamento distintos, como concentração do fotossensibilizador, tempo de incubação e associação com surfactante, para ambas as fases de crescimento das hifas, conhecidas como fase clara e escura, e fase de esporos infecciosos. Os resultados preliminares mostram o potencial da utilização da TFDa para a inativação e controle do crescimento de *R. oryzae*.

Palavras-chave: Inativação fotodinâmica. *Rhizopus oryzae*. Controle de crescimento.

Agência de fomento: CAPES (88887.601513/2021-00)

Referências:

- 1 RODEN, M. M. *et al.* Epidemiology and outcome of zygomycosis: a review of 929 reported cases, *Clinical Infection Diseases.*, v. 41, n. 5, p. 634–653, 2005. DOI: 10.1086/432579.
- 2 KONOPKA, K.; GOSLINSKI, T. Photodynamic therapy in dentistry, *Journal Dental Research.*, v. 86, n. 8, p. 694–707, Aug. 2007. DOI: 10.1177/154405910708600803.

PG34

Nonequilibrium thermodynamics of process optimization using optical tweezers

MARTINS, Thalyta Tavares; MUNIZ, Sérgio Ricardo; KAMIZAKI, Lucas Prado

thalyta@usp.br

The recent ability to trap and control microscopic systems has enabled a growing number of experimental studies of stochastic thermodynamics. Exploiting the versatility of optical tweezers (1), this work presents experimental measurements of the energy cost of nonequilibrium protocols applied to a Brownian particle in a controlled harmonic potential. Here, we study optimal and (suboptimal) linear protocols for a time-dependent trap (2) and also compute the Jarzynski relation (3) as an independent consistency check.

Palavras-chave: Optical tweezers. Stochastic thermodynamics. Optimal protocols.

Agência de fomento: CAPES (88887.370240/2019-00)

Referências:

- 1 MARTINS, T. T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos**. 2019. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.
- 2 SCHMIEDL, T.; SEIFERT, U. Optimal finite-time processes in stochastic thermodynamics. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 10, p. 108301, 2007.
- 3 JARZYNSKI, C. Nonequilibrium equality for free energy differences. **Physical Review Letters**, v. 78, n. 14, p. 2690, 1997.

PG35

Insights of Solid State NMR: the Non-Linear Macroscopic Properties of Silica-Aluminophosphate Glasses

SANTOS, Millena Logrado dos; ECKERT, Hellmut; IKEDA, Hikaru; NAKANE, Shingo; YAMAZAKI, Hiroki

millena.santos@usp.br

The last three decades have seen the ongoing progress of glassy technologies, with the development of material engineering and characterization methods, both crucial elements to this achievement. In this context the technique of Solid-State Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy assumes a central role by its capability to probe the local environment of the nuclei in an element-selective fashion. (1) Exploring the potential of NMR, in the present work, we investigate optical fiber glass with the composition $(59 - x)\text{P}_2\text{O}_5 - x\text{SiO}_2 - 13\text{Al}_2\text{O}_3 - 28\text{Na}_2\text{O}$ ($0 \leq x \leq 13$), which shows non-linear behaviour of weathering stability, glass transition temperature, and thermal expansion coefficient as a function of x . While ^{31}P MAS-NMR results suggest that the phosphate units are dominantly of the $\text{P}^{(2)}$ (metaphosphate) type, $^{31}\text{P}(^{23}\text{Na})$ and $^{31}\text{P}(^{27}\text{Al})$ REAPDOR experiments (2) indicate two distinct environments with different strengths of the interaction with ^{23}Na and ^{27}Al nuclei. ^{29}Si NMR spectra are consistent with Si-O-Si and Si-O-P connectivities and the absence of six-coordinated silicon units that are observed in Al-free glasses with similar Na:Si:P ratios. (3) ^{31}P spin echo decay experiments confirm the decrease of P-O-P connectivity with increasing x , providing a rationale for the increase in weathering stability for the composition range $x \leq 6$. As none of the mentioned structural trends alone are able to explain the above-mentioned non-linear compositional evolution, it must be attributed to a superposition of multiple structural changes.

Palavras-chave: NMR. Phosphosilicate glass. Structure.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 KROEKER, S. Nuclear magnetic resonance spectroscopy. *In*: AFFATIGATO, M. (ed.). **Modern glass characterization**. Hoboken: Wiley, 2015. p. 1-30
- 2 GULLION, T. Measurement of dipolar interactions between spin-1/2 and quadrupolar nuclei by rotational-echo, adiabatic-passage, double-resonance NMR. **Chemical Physics Letters**, v. 246, n. 3, p. 325, 1995.
- 3 REN, J.; ECKERT, H. Superstructural units involving six-coordinated silicon in sodium phosphosilicate glasses detected by solid-state NMR spectroscopy. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 122, n. 48, p. 27620–27630, 2018.

PG36

Majorana-based transistor

DOURADO, Rodrigo; EGUES, Jose Carlos

rad.univasf@gmail.com

One of the most promising avenues to scalable fault-tolerant quantum computation is based on topological superconductors. (1-2) In such devices, logical operations are performed by exploring the non-Abelian statistics of its zero-energy excitations called Majorana bound states (MBSs). Interestingly, MBSs always come in pairs, due to parity conservation, and are localized at opposite sides of the superconductor, which provides remarkably robustness against local noise. In this work, we propose a Majorana-based transistor by exploring this (Majorana) nonlocality. To this end, we couple a Majorana wire to a quantum dot (QD), which is connected to two metallic leads (3), source and drain, and to a third lead at the other end of the wire, acting as the gate of the transistor. We calculate the density of states (DOS) on the dot and the transversal source-drain (across the QD) current, by calculating the retarded Green's function and the s-matrix, respectively. Our results show that the coupling to the "gate" lead, tunable with an electrostatic potential, controls the DOS on the dot and, consequently, the conductance. The mechanism that allows this control is the nonlocal nature of the MBSs wavefunctions and the hybridization between them. Our work provides a new direction to the control of edge states in multi-terminal devices via asymmetric coupling to metallic leads.

The authors acknowledge the support from the São Paulo Research Foundation (FAPESP) Grants No. 2016/08468-0, No. 2018/19017-4, No. 2020/00841-9, and from Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq), Grant No. 306122/2018-9.

Palavras-chave: Majorana bound states. Topological superconductivity. Quantum transport.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

- 1 PRESKILL, J. **The physics of quantum information**. 2022. Disponível em: arXiv preprint arXiv:2208.08064.2022. Acesso em: 31.09.22.
- 2 KITAEV, A.Y.. Fault-tolerant quantum computation by anyons. **Annals of Physics**, v.303, n.1, p.2-30,2003.
- 3 VERNEK, E. *et al.* Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. **Physical Review B**, v. 89, n.16, p.165314,2014.

PG37

Explorando processos quânticos não-Markovianos dentro do formalismo do tensor de processo

ZAMBON, Guilherme Clarck

guilhermezambon@usp.br

A descrição da evolução temporal de sistemas quânticos abertos é um tópico de grande interesse tanto pela sua ampla gama de aplicações tecnológicas quanto pela compreensão de aspectos fundamentais da teoria quântica. Tradicionalmente, essa descrição é realizada por meio do formalismo de mapas dinâmicos quânticos, que se restringe a processos sem correlações iniciais entre sistema e ambiente, dada a impossibilidade de se obter funções de correlação multitemporais para os processos descritos. (1) Mais recentemente, foi proposta uma abordagem alternativa para descrever a dinâmica de sistemas quânticos abertos: o formalismo do tensor de processo. (2) Esse tensor pode ser construído operacionalmente e então utilizado para se obter as correlações multitemporais do processo, superando as limitações do formalismo de mapas dinâmicos quânticos. A principal vantagem do tensor de processo é caracterizar univocamente os efeitos de memória presentes em dinâmicas de sistemas abertos, permitindo um estudo completo de propriedades específicas de processos quânticos não-Markovianos. O objetivo deste trabalho é aplicar o formalismo do tensor de processo para analisar como se relacionam as diversas propriedades de um sistema quântico que apresenta dinâmica não-Markoviana. Em particular, busca-se utilizar o tensor de processo para incorporar correlações iniciais e multitemporais a tratamentos conhecidos da termodinâmica de sistemas quânticos, como o protocolo de medição em dois pontos e as definições de trabalho e calor em trajetórias estocásticas. É esperado, dessa forma, obter uma descrição termodinâmica que leve em conta todos os efeitos quânticos presentes na evolução do sistema de interesse.

Palavras-chave: Sistemas quânticos abertos. Informação quântica. Termodinâmica quântica.

Agência de fomento: FAPESP (2022/00993-9)

Referências:

- 1 MILZ, S.; KIM, M. S.; POLLOCK, F. A.; MODI, K. Completely positive divisibility does not mean Markovianity. **Physical Review Letters**, v.123, n.4, p.040401, July 2019.
- 2 POLLOCK, F. A.; RODRÍGUEZ-ROSARIO, C.; FRAUENHEIM, T.; PATERNOSTRO, M.; MODI, K. Non-Markovian quantum processes: complete framework and efficient characterization. **Physical Review A**, v.97, p.012127, Jan. 2018.

PG38

Buscas indiretas de matéria-escura com observatórios de raios-gama.

MASSINO, Eduardo Galvani; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de

eduardo.massino@alumni.usp.br

É geralmente aceito hoje em dia que a densidade de matéria do Universo consiste principalmente de um componente desconhecido, chamada matéria-escura (DM). Acredita-se também que a matéria-escura é formada por uma nova partícula elementar que seria neutra, estável e não-bariônica. Em regiões de alta densidade do Universo a matéria-escura pode se auto aniquilar e produzir um forte sinal de raios-gama. (1) Entre todos os possíveis alvos de observação, as galáxias anãs do Grupo Local estão entre as mais promissoras para descobertas devido ao seu grande conteúdo de matéria-escura, com até $\mathcal{O}(10^3)$ vezes mais massa de matéria-escura do que de matéria visível, e à falta de ruído de fundo astrofísico. (2) Nenhum sinal de matéria escura foi detectado até agora e os dados foram usados para encolher o espaço de parâmetros permitido para partículas de matéria-escura. Neste projeto estudaremos modelos de física de partículas que vão além do modelo padrão, incluindo *Secluded Dark Matter* e novos dubletos de escalares. Ao mesmo tempo, novos observatórios de raios-gama estão se tornando operacionais. O Cherenkov Telescope Array (CTA) vai melhorar a sensibilidade dos telescópios terrestres por um fator 10, permitindo o estudo de fontes mais fracas. A comunidade internacional também propõe a construção de um observatório de raios gama com amplo campo de visão, que será complementar ao CTA na América do Sul. Finalmente, o satélite FERMI (3) irá continuar a obter dados de todo o céu nos próximos 5-10 anos. Este projeto de mestrado visa utilizar modelos e simulações computacionais para melhorar a sensibilidade de detecção de possíveis sinais de matéria escura que poderão ser obtidos pelos futuros observatórios de raios-gama.

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

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 SIQUEIRA, C. Secluded dark matter in light of the Cherenkov telescope array (CTA). **Physics Letters B**, v.797, p.134840, 2019.
- 2 IOCCO, F.; PATO, M.; BERTONE, G. Evidence for dark matter in the inner Milky Way. **Nature Physics**, v.11, n.3, p.245–248, Feb. 2015.
- 3 ARLEN, T. *et al.* Constraints on cosmic rays, magnetic fields, and dark matter from gamma-ray observations of the coma cluster of galaxies with veritas and fermi. **Astrophysical Journal**, v.757, n.2, p.123, Oct. 2012.

PG39

Trabalho como Funcional Dependente da Simetria: uma Abordagem por Integral de Trajetória

AFONSO, Ricardo; PINTO, Diogo Soares

ricardo.afonso@ifsc.usp.br

A termodinâmica quântica pode ser considerada uma área emergente que investiga as relações entre a mecânica estatística fora do equilíbrio e os processos quânticos. Seu desenvolvimento envolve desde o papel da coerência e do emaranhamento na transferência de calor em dispositivos e máquinas térmicas quânticas até formulações fundamentais de variáveis termodinâmicas ao nível de flutuações quânticas. Nas últimas décadas, com o advento da termodinâmica estocástica, a primeira e a segunda lei passaram a ter uma formulação mais detalhada, em que variáveis termodinâmicas como o trabalho, o calor e a entropia são funcionais dependentes de trajetórias estocásticas e obedecem a relações de flutuação em processos termodinâmicos. (1) Logo, para ser possível estender a termodinâmica para o regime quântico é necessário derivar tais relações de flutuação para processos quânticos. Embora haja um extensivo progresso da obtenção de tais relações no formalismo usual da mecânica quântica, nosso projeto se concentra em derivar teoremas de flutuação que também definam as variáveis termodinâmicas por meio de funcionais. O uso do método de integrais de caminho de Feynman sucede em derivar teorema de flutuação para o trabalho, o que trouxe não somente sua definição como um funcional, mas também mostrou correções quânticas à definição clássica de trabalho. (2) Além disso, tal definição parece depender intrinsecamente do protocolo de medidas projetivas no início e no final do processo, eliminando qualquer influência de estados coerentes e, ao mesmo, tempo calibrando o sistema para uma base específica cuja quebra de simetria no contorno de Schwinger-Keldysh não se expressa explicitamente nos funcionais. (3) Portanto, escolhemos para este resumo demonstrar ser possível avaliar a quebra de simetria no protocolo de medidas projetivas, utilizando um contorno de Schwinger-Keldysh específico, em que fica claro que própria definição do funcional dado ao trabalho depende da escolha do contorno utilizado para executar a integral de trajetória.

Palavras-chave: Integral de trajetória. Mecânica quântica. Trabalho.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 JARZYNSKI, C. Equalities and inequalities: Irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale, **Annual Review Condensed Matter Physics**, v. 2, p.329, 2011.
- 2 FUNO, K.; QUAN, H. Path integral approach to quantum thermodynamics. **Physical Review Letters** v. 4, p.040602, 2018.
- 3 JOONHYUN, Yeo. Symmetry and its breaking in a path-integral approach to quantum brownian motion. **Physical Review E**, v.100, n.6, p.062107, 2019.

PG40

Cluster epa de Enterococcus faecalis : EpaE

DANTAS, Livia; NASCIMENTO, Alessandro

livia.clementino@usp.br

A resistência de patógenos a antimicrobiano é um problema de saúde pública, com tendência a se agravar ao longo do tempo. A consequência dessa resistência é refletida no número de mortes provocadas por infecções de tais microrganismos. (1) No contexto de resistência bacteriana a antibióticos, iniciou-se o estudo de enzimas presentes no cluster gênico *epa* (2), de *Enterococcus faecalis*. As proteínas Epa sintetizam e exportam alguns carboidratos constituintes da parede celular de *Enterococcus*, envolvidos também na composição de biofilmes. Das proteínas Epa, a enzima EpaE teve sua estrutura determinada. Um conjunto de dados foi coletado na linha Manacá do anel síncroton brasileiro, o Sirius. O grupo espacial do cristal é o P 21, e apresenta fração de twinning pseudomeroedral. A estrutura da EpaE foi determinada a 2.8 Å de resolução. A docagem molecular a partir da similaridade estrutural com a molécula dTTP, um dos reagentes da EpaE, foi realizada pelo LiBELa. (3) Das moléculas selecionadas, testou-se o poder de interação entre a EpaE com Doripenem, Benzthiazida e Bicalutamida por thermofluor. Esta técnica analisa a temperatura de desenovelamento proteico em diferentes condições na qual a proteína foi exposta. Compostos que gerarem um Tm parecido com o obtido na presença dos ligantes da EpaE, dTTP, glicose-1-fosfato e magnésio, provavelmente também se ligam à esta enzima, indicando potenciais inibidores da EpaE.

Palavras-chave: Resistência bacteriana a antibióticos. *Enterococcus faecalis*. Biofilme. *Cluster epa*.

Agência de fomento: FAPESP (2017/24901-8)

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **New report calls for urgent action to avert antimicrobial resistance crisis**. 2019. Disponível em: <https://www.who.int/news-room/detail/29-04-2019-new-report-calls-for-urgent-action-to-avert-antimicrobial-resistance-crisis>. Acesso em: 01.09.22.
- 2 XU, Y. *et al.* Analysis of a gene cluster of *Enterococcus faecalis* involved in polysaccharide biosynthesis. **Infection and Immunity**, v. 68, n. 2, p. 815–823, 2000. ISSN 00199567.
- 3 MUNIZ, S.; NASCIMENTO, A. S. Ligand- and receptor-based docking with LiBELa, **Journal of Computer-Aided Molecular Design**, v.29,n.2,p.713-723, June, 2015.

PG41

Desenho inteligente de dispositivos fotônicos fabricados via polimerização por dois fótons

PARRA, Ian; MENDONÇA, Cleber

icparra@usp.br

A fotônica surgiu como uma solução viável para demandas cada vez maiores por comunicação mais rápida de grandes quantidades de dados. O uso de plataformas orgânicas em dispositivos fotônicos integrados (on-chip), embora seja uma opção interessante para este tipo de tarefas, ainda é bastante escasso. De fato, há poucas investigações desta natureza em estruturas orgânicas, principalmente fabricadas via fotopolimerização por dois fótons, embora tais estudos já sejam relativamente avançados em estruturas semicondutoras. (1) O desenho de dispositivos fotônicos é geralmente realizado baseado na intuição, onde se escolhe uma estrutura geral, de acordo com a teoria analítica e se realizam simulações através do ajuste de alguns parâmetros. Embora essa metodologia tenha tido um longo histórico de sucesso, ela produz dispositivos que não apresentam necessariamente um desempenho ideal (2) Por exemplo, se a área de projeto tem $m \times p$ pixels, para um material binário existem $\sim 2^{m \times p}$ possíveis dispositivos, o que torna impossível encontrar a estrutura ótima. (2) O intuito desse trabalho é apresentar as metodologias mais eficientes para fazer um desenho inteligente (DI) de um demultiplexador de feixe (DF) usando algoritmos baseados em gradiente descendente. Tais algoritmos provaram ser uma ferramenta poderosa para o projeto de dispositivos nanofotônicos lineares arbitrários. Finalmente, se pretende construir o dispositivo via fotopolimerização por dois fótons usando um laser de Ti:safira centrado em 780 nm, que fornece pulsos de aproximadamente 100 fs a uma taxa de repetição de 86 MHz. Um DF $1 \times n_{out}$ (uma entrada e n_{out} saídas) é um dispositivo que possui uma distribuição especial de índices de refração η_i que modifica, seleciona e controla o fluxo e as propriedades da luz num lado: comprimento de onda λ_i . Neste trabalho será usado o software SPINS-B. (3) para mapear eficientemente todo o espaço de estruturas fabricáveis, selecionando a melhor solução que descreve o dispositivo de maior eficiência. O algoritmo foi desenvolvido pelo grupo da Prof. Vuckovic da Universidade de Stanford e foi disponibilizado para download através do GitHub. Nesta etapa do projeto estamos nos familiarizando com os algoritmos e fundamentos de (DI), bem como adaptando o software para as dimensões e índices de refração de interesse para polimerização por dois fótons.

Palavras-chave: Desenho inteligente. Gradiente descendente. Fotopolimerização.

Agência de fomento: CAPES (88887.644584/2021-00)

Referências:

- 1 MOURADIAN, S. L. *et al.* Scalable integration of long-lived quantum memories into a photonic circuit. **Physical Review X**, v. 5, n.3, p. 031009, 2015.
- 2 PIGGOTT, A. Y. **Automated design of photonic devices** 2018. Dissertation (Doctor of Philosophy) Stanford University, 2018.

3 SU, L. *et al.* Nanophotonic inverse design with SPINS: software architecture and practical considerations. **Applied Physics Review**, v.7, n.1, p.011407, 2020.

PG42

Estudos biofísicos e estruturais das septinas de *Drosophila melanogaster*

FERNANDES, Adriano; CABREJOS, Diego Antonio Leonardo; CAVINI, Italo Augusto; ROSA, Higor; PEREIRA, Humberto D.; NASCIMENTO, Alessandro; GARRATT, Richard

adriano.fernandes@usp.br

As septinas são proteínas conhecidas originalmente por atuarem na formação do septo durante brotamento em *Saccharomyces cerevisiae*. (1) Foram descritos em fungos e animais, e ausentes em plantas e bactéria. Apresentam como principais características um domínio conservado de ligação aos nucleotídeos de guanina (GTP/GDP) e a formação de filamentos oligoméricos, que são estruturas altamente organizadas. (1) Para os estudos de septinas deste trabalho foi escolhido como organismo modelo *Drosophila melanogaster*, ou mosca-da-fruta, um organismo modelo representante da classe dos insetos. Esta espécie possui cinco genes codificantes às septinas Sep1, Sep2, Sep4, Sep5 e Pnut e filamentos se formam a partir da polimerização de hexâmeros lineares, sendo que o mais bem caracterizado tem a seguinte organização Sep1-Sep2-pnut-pnut-Sep2-Sep1. (2) Apesar do conhecimento dos genes relativos às septinas de *Drosophila melanogaster*, ainda há carência de informações estruturais de alta resolução que permitiriam compreender a montagem do hexâmero da forma correta. (3) Neste estudo foram investigados parâmetros biofísicos e estruturais destas septinas em solução, bem como avaliada a formação de complexos. Foi determinado a estrutura do heterodímero Sep1(G).Sep2(G) por difração de raios-X com resolução de 2,38 Å, sendo este o primeiro resultado experimental com informações estruturais para septinas desta espécie. Além disto, foram realizadas modelagens computacionais por homologia, dinâmica molecular e experimentos de *Adaptive Steered Molecular Dynamics* (ASMD) a fim de investigar os aminoácidos fundamentais para estabilizar as interações entre subunidades essenciais para a polimerização e por consequência, suas funções celulares. Mutagênese sítio-dirigida foi usado para testar hipóteses que surgiram a partir da modelagem e servir para demonstrar uma diferença estrutural importante na interface central do hexâmero quando comparado com o complexo humano equivalente.

Palavras-chave: Septinas. Cristalografia de raios-X. Simulação.

Agência de fomento: CNPq (140739/2017-3)

Referências:

- 1 HARTWELL, 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 of the United States of America**, v. 66, n. 2, p. 352-359, June 1970.
- 2 NEUFELD, T. P.; RUBIN, G. M. The *Drosophila* peanut gene is required for cytokinesis and encodes a protein similar to yeast putative bud neck filament proteins. **Cell**, v. 77, n. 3, p. 371-379, May 1994.
- 3 ADAM, J. C.; PRINGLE, J. R.; PEIFER, M. Evidence for functional differentiation among *Drosophila* septins in cytokinesis and cellularization. **Molecular Biology Cell**, v. 11, n. 9, p. 3123-3135,

Sept.2000.

PG43

Searching for dark matter in dwarf galaxies with 14 years of observations of the Fermi Large Area Telescope

SILVA, Leandro; VIANA, Aion

leandro.silva@ifsc.usp.br

Astrophysical observations and cosmological evidence suggests that dark matter (DM) constitutes $\sim 84\%$ of the matter density of the Universe. Many particle DM candidates are predicted to annihilate or decay into energetic Standard Model particles, and depending on the DM particle mass and annihilation cross section or decay rate, these interactions may produce γ rays. (1) In this work, we selected 15 dwarf spheroidal galaxies (dSphs) to analyze eventual excess of gamma rays from 14 years of observations of the Fermi Large Area Telescope (Fermi-LAT), and interpret it as coming from DM annihilation. These targets are excellent objects for this analysis because of their proximity, large abundance of dark matter and, most important, the absence of observational evidence for other non-thermal astrophysical processes that could produce γ rays. In light of the above, we evaluated the detected signal using a maximum log-likelihood method, creating a test statistic (TS). Eventual detections produce a $TS > 25$, for signals with lower TS we present γ -ray flux upper limits between 500 MeV and 500 GeV. (2) In the absence of a significant signal detection, we combine the Fermi-LAT observations of all 15 dwarf galaxies to constrain the dark matter annihilation cross section for dark matter particles with masses between 2 GeV and 10 TeV in different DM particle model scenarios.

Palavras-chave: Dark-matter. Indirect-detection. Likelihood-estimation.

Agência de fomento: CAPES (88887.643239/2021-00)

Referências:

- 1 ALBERT, Andrea, *et al.* Searching for dark matter annihilation in recently discovered Milky Way satellites with Fermi-LAT. **Astrophysical Journal** v.834, n. 2 p. 110,2017.
- 2 ACKERMAN, M. ; ALBERT,A. **Searching for dark matter annihilation from Milky Way dwarf spheroidal galaxies with six years of Fermi-LAT data.** Disponível em:arXiv preprint arXiv:1503.02641.Acesso em: 05.09.22.

PG44

Converting images into complex networks by deterministic walks.

MERENDA, João Vitor; BRUNO, Odemir Martinez

joao.merenda@usp.br

Texture analysis and image recognition have been really influential fields in computer science. Several methods emerged over the years, and one of the most well-succeded methods is the deterministic tourist walk (DTW). The deterministic tourist walk (DTW) has been used successfully to classify images and networks. (1-2) The DTW method can extract meaningful information from images allowing a high accuracy to texture classification. (3) In this work, we use the DTW method as a transformation able to convert pictures into complex networks and then represent images in terms of network measurements (e.g., the network degree) instead of the color intensity. The outcomes show that this transformation preserves meaningful information on texture that enables us to classify images.

Palavras-chave: Complex network. Texture analysis. Texture classification.

Agência de fomento: CAPES (88887.601525/2021-00)

Referências:

- 1 GONÇALVES, Wesley Nunes *et al.* Texture descriptor based on partially self-avoiding deterministic walker on networks. **Expert Systems with Applications**, v. 39, n. 15, p. 11818-11829, 2012.
- 2 SILVA, T. C.; AMANCIO, D. R. Discriminating word senses with tourist walks in complex networks. **European Physical Journal B**, v. 86, n. 7, p. 1-11, 2013.
- 3 BACKES, A.R. *et al.* Texture analysis and classification using deterministic tourist walk. **Pattern Recognition**, v. 43, n. 3, p. 685-694, 2010.

PG45

Estudos termodinâmicos de gases quânticos (Condensados de Bose-Einstein), à nível local e global

MARTINS, Edmur

ed_uspi1@usp.br

Entre os diversos sistemas físicos, atuamos no sistema de condensados de Bose-Einstein, que são gases diluídos com discretização da energia ou sistemas quânticos. Nesses sistemas estudamos algumas quantidades em contextos termodinâmicos. A abordagem dos estudos são feitas tanto em gases ideais quanto interagentes, armadilhados. Pelo fato de o sistema ser inhomogêneo, em termos de densidade de número, isso gera como consequência impacto em grandezas termodinâmicas. Nesse trabalho apresentamos uma equação de estado para termodinâmica local (1-2) ao invés da termodinâmica global, que gera valores médios das grandezas. Isso permite estudos mais detalhados do sistema, além de ser possível uma comparação entre as termodinâmicas local e global. (3) Por outro lado, iniciamos estudos relacionados a termodinâmica global com uma equação de estado impregnada de coeficientes. Com esses estudos é possível estudar e analisar dados do laboratório. Também, tem-se interesse em estudos com ciclos termodinâmicos, de caráter quântico.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein. Termodinâmica local e global. Equação de estado.

Agência de fomento: Sem auxílio

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, 2010. DOI: 10.1088/1367-2630/12/10/103026.
- 2 ITAEVSKI, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein condensation and superfluidity**. United States of America: Oxford University Press, 2016.
- 3 ROCHÍN, V. R. Equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap: the role of the "Harmonic" pressure. **Physical Review Letters** v. 94, p.130601-1-130601-4, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.130601.

PG46

Plasmon-enhanced light-matter interaction in MoS₂ monolayer by Gold Nanostructures

LEMES, Matheus Fernandes Sousa; MAREGA JUNIOR, Euclydes; MAREGA, Guilherme Migliato; KIS, Andras

matheus.lemes@usp.br

Monolayer transition metal dichalcogenides (TMDs) with a direct bandgap hold enormous potential for designing novel electronic and optoelectronic devices. (1) However, their atomic-thin thickness leads to inefficient light-matter interactions and hinders more versatile applications. (2) One promising solution to overcome this problem is hybridizing the 2D-TMDs with plasmonic structures to increase the optical absorption of the monolayer materials. (3) Here, we report on the fabrication of MoS₂-coated gold nanostructures and their characterization by photoluminescence (PL) and lifetime measurements. For excitation with an energy above the bandgap, we observed a PL enhancement of 400-fold and that the decay profiles were well-fitted by a triple-exponential decay curve, demonstrating the existence of different relaxation processes. In contrast, if the incident photon energy is below the direct bandgap, the enhancement was just 120-fold and the characteristic lifetimes are shorter than in the previous case, showing absorption of light by the plasmonic metal nanostructure, its conversion into hot electron-hole pairs, and subsequent injection into MoS₂ happens at faster timescales. This study shines a light on the plasmonic-excitonic interaction in these hybrid metal/semiconductor devices and paves the way toward implementing plasmon-enhanced transition metal dichalcogenide photodetectors, sensors, and emitters.

Palavras-chave: Two-dimensional materials. Plasmonics. Light-matter interaction.

Agência de fomento: CAPES (88887.609043/2021-00)

Referências:

- 1 LOPEZ-SANCHEZ, O. *et al.* Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂. **Nature Nanotechnology**, v. 8, n. 7, p. 497-501, 2013.
- 2 LI, Z. *et al.* Active light control of the MoS₂ monolayer exciton binding energy. **ACS Nano**, v. 9, n. 10, p. 10158-10164, 2015.
- 3 LINIC, S.; CHRISTOPHER, P.; INGRAM, D. B. Plasmonic-metal nanostructures for efficient conversion of solar to chemical energy. **Nature Materials**, v. 10, n. 12, p. 911-921, 2011.

PG47

Avaliação dos mecanismos de fotobioestimulação na bioenergética mitocondrial

MEZZACAPPO, Natasha Ferreira; INADA, Natalia; PEREZ, Aline Sanches; CASTILHO, Roger Frigerio; SIQUEIRA-SANTOS, Edilene de Souza; VERCESI, Anibal Eugenio; BAGNATO, Vanderlei Salvador

natasha.mezzacappo@usp.br

A fotobiomodulação (FBM) é uma modalidade terapêutica utilizada no tratamento de várias doenças, sendo baseada na interação da luz com os tecidos biológicos, promovendo efeitos como regeneração de feridas, alívio da dor e redução da inflamação. As fontes de luz são majoritariamente LASERs emitindo na região do vermelho e infravermelho próximo. Diversos estudos propõem que a mitocôndria seja o principal alvo da FBM à nível celular, onde a absorção de fótons levaria aos resultados terapêuticos observados. No entanto, ainda há muitas lacunas na literatura a respeito dos efeitos dos fótons nas mitocôndrias. (1) Com isso, o objetivo desse estudo é investigar as interações dos fótons à 635 nm na bioenergética mitocondrial, através de medidas de respiração mitocondrial empregando técnicas como a respirometria de alta resolução. As mitocôndrias foram isoladas de fígado de camundongo (linhagem C57BL/6) e irradiadas com um feixe de LASER em 635 nm durante as medidas de respiração mitocondrial, com duração de 330 segundos. Utilizando substratos de complexo I (glutamato + malato), a fosforilação oxidativa (estado 3) foi estimulada com a adição ADP, a respiração não fosforilativa (estado 4) foi obtida adicionando-se oligomicina, e por último acrescentou-se CCCP para desacoplar a cadeia de elétrons e obter a respiração máxima. (2) As amostras de mitocôndrias foram utilizadas em duas concentrações diferentes: 0,25 e 0,5 mg/mL. Os efeitos da irradiação foram mais pronunciados ao utilizar-se potências de 600 a 800 mW e com a concentração de amostra a 0,25 mg/mL. Observou-se um aumento significativo (~60%) na razão de controle respiratório (RCR), provocado principalmente pela redução da respiração no estado 4, e também alterações na respiração desacoplada com CCCP. Os resultados indicam que a bioenergética mitocondrial está sendo modulada pela irradiação em 635 nm nessas condições, permitindo que outros parâmetros sejam analisados para complementar as observações, como inchamento e potencial de membrana mitocondrial.

Palavras-chave: Fotobiomodulação. Bioenergética. Mitocôndria.

Agência de fomento: CAPES (88887.506832/2020-0)

Referências:

- 1 HAMBLIN, M. R. Mechanisms and mitochondrial redox signaling in photobiomodulation. **Photochemistry and Photobiology**, v. 94, n. 2, p. 199-212, Mar. 2018.
- 2 RONCHI, J. A. *et al.* A spontaneous mutation in the nicotinamide nucleotide transhydrogenase gene of C57BL/6J mice results in mitochondrial redox abnormalities. **Free Radical Biology and Medicine**, v. 63, p. 446-456, Oct. 2013. DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2013.05.049.

PG48

Bases estruturais do perfil de resistência dos compostos nirmatrelvir e ensitrelvir contra polimorfismos em circulação da enzima Main Protease (Mpro) do vírus SARS-CoV-2

NOSKE, Gabriela Dias; GODOY, Andre de; OLIVA, Glaucius; DOLCI, Isabela; SILVA, Ellen Sousa; GODOY, Mariana Ortiz de; FERNANDES, Rafaela; GUIDO, Rafael

gabriela.noske@usp.br

O vírus SARS-CoV-2 é o agente causador da COVID-19, uma doença infecciosa altamente contagiosa responsável pela pandemia que teve início em março de 2020. (1) O genoma viral contém uma ORF (ORF1ab), que codifica duas poliproteínas (pp1a e pp1ab) contendo proteínas não-estruturais do vírus, essenciais para sua replicação. Uma das proteínas não estruturais, a enzima nsp5 Mpro é pertencente à família das cisteíno proteases, possui estrutura dimérica e é responsável pela clivagem das poliproteínas virais em 11 sítios, auxiliando na liberação das proteínas virais maduras.(1) Dada sua importância no ciclo de replicação, é evidente que ela representa um importante alvo no planejamento de potenciais candidatos antivirais, já possuindo diversos inibidores com eficácia antiviral. Dentre eles, destacamos o nirmatrelvir, desenvolvido pela Pfizer, e o ensitrelvir, da farmacêutica Shionogi. (1-2) O uso de antivirais é frequentemente associado ao surgimento de resistência viral, como observado para diversos vírus, incluindo HCV e HIV. Desta forma, o objetivo principal deste projeto foi caracterizar 14 polimorfismos virais em circulação e avaliar a eficácia dos inibidores nirmatrelvir e ensitrelvir contra a enzima Main Protease. A fim de prever a resistência aos compostos, selecionamos polimorfismos da enzima Mpro de SARS-CoV-2 naturalmente observados. Para isto, utilizamos o banco de dados de sequências virais GISAID hCoV-19/SARS-COV-2 para a proteína Mpro e selecionamos todos os mutantes com distância menor que 7 Å do sítio ativo e frequência maior de 10. Clonagem, expressão e purificação foram realizadas como descritas previamente (3), utilizando a construção da enzima que possui a sequência de auto-clivagem na região N-terminal. Os mutantes foram obtidos através de mutagenese sítio-dirigida, tendo como molde para a PCR-inversa o plasmídeo contendo a sequência codificante da enzima. Ambos os mutantes foram purificados através de precipitação por sulfato de amônia, seguida de cromatografia de troca aniônica. Para caracterização dos mutantes e sua resistência contra os inibidores, determinamos a potência inibitória (IC₅₀) dos compostos utilizando ensaio enzimático baseado em FRET. Além disso, realizamos a caracterização estrutural, a partir da obtenção de suas estruturas cristalográficas, incluindo da enzima WT, em complexo com nirmatrelvir e ensitrelvir. A coleta de dados foi realizada na linha MANACA, no SIRIUS e a resolução da estrutura feita utilizando o método de substituição molecular. Nirmatrelvir manteve sua inibição na faixa de nanomolar para grande parte dos polimorfismos, exceto para os mutantes G143S e Q189K que foram associados a uma maior resistência. Para o ensitrelvir, a maior resistência foi observada para os mutantes M49I, G143S e R188K, porém não para Q189K, o que sugere um perfil de resistência distinto para os compostos. As estruturas cristalográficas dos polimorfismos selecionados mostraram a base estrutural responsável pela geração de resistência. Desta forma, nossos dados podem auxiliar no monitoramento da emergência de potenciais linhagens virais resistentes aos inibidores em questão, sugerindo que o desenvolvimento de terapia combinada de fármacos pode evitar o surgimento de resistência, assim como a caracterização destes polimorfismos, pode auxiliar no desenvolvimento de novos inibidores da enzima Mpro.

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Main-Protease. Nirmatrelvir.

Agência de fomento: FAPESP (2018/25600-4)

Referências:

- 1 OWEN, D.R. *et al.* An oral SARS-CoV-2 Mpro inhibitor clinical candidate for the treatment of COVID-19. **Science**, v. 374, p. 1586-1593, 2021.
- 2 UNOH, Y. *et al.* Discovery of S-217622, a noncovalent Oral SARS-CoV-2 3CL protease inhibitor clinical candidate for treating COVID-19. **Journal Medical Chemistry**, v. 65, n.9,p. 423 6499–6512, 2022.
- 3 NOSKE, G. D. *et al.* A Crystallographic Ssnapshot of SARS-CoV-2 main protease maturation process. **Journal Molecular Biology**, v.433,n.18, p. 167118, Sept.2021.

PG49

Utilização da terapia fototérmica e agentes clareadores ópticos para tratamento do melanoma cutâneo

MARTINELLI, Letícia Palombo; JASINEVICIUS, Gabriel Oliveira; MORIYAMA, Lilian Tan; BUZZA, Hilde Harb; CHEN, Juan; ZHENG, Gang; KURACHI, Cristina

leticia.martinelli@usp.br

O melanoma é o tipo mais agressivo de câncer de pele e um relevante problema de saúde devido à sua crescente incidência e pouca resposta às opções de tratamento atualmente disponíveis. Apesar de sua baixa incidência, apresenta altas taxas de mortalidade. (1) O tratamento padrão para o melanoma cutâneo ainda é a ressecção cirúrgica, mas a radioterapia, a quimioterapia e a imunoterapia também estão sendo investigadas. Há necessidade, portanto, de desenvolver novas opções terapêuticas. A terapia fototérmica (TFT) é uma técnica baseada no uso de um composto denominado fotossensibilizador (FS) e da luz em comprimento de onda adequado para sua ativação. Ao ganhar energia provida da luz, o FS vai para um estado excitado e volta ao estado fundamental liberando calor. (2) No caso do melanoma cutâneo, em decorrência da alta concentração de melanina ser um dos principais absorvedores biológicos, terapias que utilizam a luz no comprimento de onda da luz visível apresentam uma pobre resposta pela grande limitação da penetração da luz no tumor. Os agentes clareadores ópticos ("Optical Clearing Agents", OCAs) vêm sendo utilizados para minimizar a atenuação da luz nos tecidos (3), especialmente em amostras biológicas para microscopia confocal. Nossa estratégia, portanto, é encontrar um protocolo eficaz para o tratamento do melanoma cutâneo em modelo animal, utilizando TFT associada ao clareamento óptico. Foi avaliado o efeito da nanoemulsão de indocianina verde (NanolCG) e dos clareadores ópticos (PEG 400 e 1,2-propanediol), além de melhorar a entrega dos OCAs no tumor. Para isso as técnicas de análise empregadas foram histologia, bem como Tomografia de Coerência Óptica (OCT). Os animais submetidos ao tratamento com NanolCG intratumoral mostraram redução completa (66,6%) ou parcial do tumor até o 14º dia após a terapia. Pelo OCT foi observado uma maior distribuição de luz do tumor após a aplicação dos clareadores, verificado pela redução do valor do coeficiente de atenuação da luz.

Palavras-chave: Melanoma. Terapia fototérmica. Agentes clareadores ópticos.

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

Referências:

- 1 PINHEIRO, A. M. C.; FRIEDMAN, H.; CABRAL, A. L. S. V. ; RODRIGUES, H. A. Melanoma cutâneo: características clínicas, epidemiológicas e histopatológicas no Hospital Universitário de Brasília entre janeiro de 1994 e abril de 1999. **Anais Brasileiro de Dermatologia**, v. 78, p. 179–186, 2003.
- 2 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions**. 3rd ed. Berlin, Springer, 2002.
- 3 MILLON, S. R.; ROLDAN-PEREZ, K. M.; RICHING, K. M.; PALMER, G. M.; RAMANUJAM, N. Effect of optical clearing agents on the in vivo optical properties of squamous epithelial tissue. **Lasers**

in **Surgery and Medicine**, v. 38, n. 10, p. 920–927, 2006.

PG50

Cavidade óptica para experimentos com átomos de Rydberg

FERNANDEZ, David Rodriguez; TORRES, Manuel Lefran; GOMES, Naomi Duarte; KONDO, Jorge Douglas Massayuki; CARDOSO, Marcos; MARCASSA, Luis Gustavo

davidrf@ifsc.usp.br

Lasers altamente estabilizados em frequência são ferramentas fundamentais em experimentos com átomos e moléculas frios. As frequências de ressonância de cavidades ópticas altamente estáveis têm provado ser as melhores fontes de referência para travar esses lasers. (1-2) Neste trabalho construímos e avaliamos o desempenho de duas cavidades ópticas com finesse média para a estabilização de lasers de comprimentos de onda 960, 780 e 680 nm, respectivamente. Os dois primeiros serão travados na mesma cavidade e usados em experimentos com átomos de Rydberg, enquanto o terceiro será usado em experimentos com moléculas frias de rubídio. O elemento fundamental de cada cavidade é um espaçador de vidro de ultrabaixa expansão (ULE), cuja temperatura é controlada através de elementos TEC dentro de uma câmara de vácuo. Com esta montagem espera-se obter um desvio de longo prazo na frequência de ressonância da ordem de 1 MHz/dia. (3) O sucesso nesta tarefa melhorará a precisão de nossos experimentos com economias próximas a 80% sobre o preço de mercado.

Palavras-chave: Cavidade óptica. Laser estável. Átomos de Rydberg.

Agência de fomento: FAPESP (2019/23510-0)

Referências:

- 1 SIEGMAN, A.E. **Lasers**. Melville: University Science Books, 1986. 1304p.
- 2 KOGELENIK, H.; LI, T. Laser beams and resonators. **Applied Optics**, v. 5, n. 10, p.1550-1560, Oct. 1966.
- 3 DE HOND, J.; CISTERNAS, N.; LOCHEAD, G.; VAN DRUTEN, N.J. Medium-finesse optical cavity for the stabilization of Rydberg lasers. **Applied Optics**, v. 56, n. 19, p.5436-4443, June 2017.

PG51

Optical dosimetry and photokinetic simulations for the analysis of indocyanine green during photodynamic therapy in the pig thoracic cage with 808 nm

TOVAR, Johan Sebastián Diaz; KASSAB, Giulia; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina

johandiaz1@ifsc.usp.br

It is of interest in biomedical optics to describe the light propagation through biological tissues to allow the development of diagnostic and therapeutic photonic techniques. (1) For external illumination of the thoracic cage is relevant to determine the behavior of light attenuation from the skin surface until lungs. Since the volume of this region is large, a model concerning the light propagation is needed to extract dosimetry parameters as the irradiance, fluence and exposure time. (2) A two custom-made prototype panel of 200 diode lasers each was used to perform the experimental assays. Each one presents a mean irradiance of $78 \pm 10 \text{ mW/cm}^2$ and centered wavelength at 808 nm. The emission wavelength, irradiance stability and temperature increase for the panel were correctly characterized. The respiration is important when considering the optical properties of the lung, since a ventilated lung does not have the same properties of a collapsed one. (3) Then for the assays, an in vivo experiment was performed in a 34 kg pig. The pig was in the prone position and the panels were placed in contact to the back. The irradiance measurements were made with an isotropic fiber that was conducted with the help of a bronchoscope in different lobes of the lung. With the value of irradiance in different regions of the lung, a simulation of the bleaching of the photosensitizer was performed using the parameters of indocyanine green diluted in PBS and PDT bleaching macroscopic model. The values achieved were of 15% of the emitted irradiance and from those values the PDT dose was calculated. These results suggest that an external illumination of the thoracic cage with NIR light effectively pass through the thoracic wall and achieve fluence levels above the ones described for lung photodynamic inactivation.

Palavras-chave: Lungs. Dosimetry. Laser.

Agência de fomento: CAPES (88887.602983/2021-00)

Referências:

- 1 DÍAZ TOVAR, J. S. *et al.* Photodynamic inactivation of *Streptococcus pneumoniae* with external illumination at 808 nm through the ex vivo porcine thoracic cage. **Journal of Biophotonics**, v. 15, n. 2, p.e2021100189, 2022.
- 2 RAMADAN, K. T. *et al.* Determination of optical properties and photodynamic threshold of Lung tissue for treatment planning of in vivo Lung perfusion assisted photodynamic therapy. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 35, p. 102353, Sept. 2021.
- 3 VERLEKER, A. P. *et al.* Optical dosimetry probes to validate Monte Carlo and empirical-method-based NIR dose planning in the brain. **Applied Optics**, v. 55, n. 34, p. 9875, Dec. 2016.

PG52

Estudos estruturais da proteína Tiamina Monofosfato Sintase de *Enterococcus faecalis* (EfThiE)

GUTIERREZ, Raissa Ferreira; NASCIMENTO, Alessandro Silva

raissa.gutierrez@usp.br

Atualmente, a busca por novos antibióticos continua sendo uma importante estratégia para o combate a microorganismos resistentes. (1) Neste contexto, estudamos enzimas da via de biossíntese de tiamina em *Enterococcus faecalis*, uma das principais causas de infecções hospitalares no mundo. Na literatura, é possível encontrar artigos que exploram essas enzimas como potenciais alvos ao combate de bactérias multirresistentes e, também do protozoário *Plasmodium falciparum*. (2) Um dos objetivos deste projeto é determinar a estrutura cristalográfica da proteína tiamina monofosfato sintase (EfThiE) de *E. faecalis*. ThiE desempenha papel central na via de biossíntese de tiamina acoplado os precursores forforilados de HMP (4-amino-2-metilpirimidina-5-il)metanol) e 5-(2-hidroxietil)-4-metil tiazol (THZ) para formar tiamina monofosfato (TMP). (3) Conjuntos de dados de difração de raios-X de EfThiE foram coletados na linha Manacá/Sirius (Campinas, Brazil). O processamento das imagens foi realizado pelo programa AutoProc, que automatiza a indexação (XDS), integração (XDS), escalonamento (Aimless) e análise de anisotropia (Staraniso). O processamento detectou que o conjunto é anisotrópico ($a = 2.5 \text{ \AA}$, $b = 2.5 \text{ \AA}$ e $c = 2.0 \text{ \AA}$) e a análise dos dados pelo programa xtriage (Phenix) detectou que o conjunto possui simetria translacional não cristalográfica (tNCS). A substituição molecular foi realizada pelo programa Phaser com um modelo de EfThiE criado pelo programa AlphaFold. O programa Autobuild (Phenix) foi utilizado para construir as cadeias das proteínas. Além dos problemas acima mencionados, detectamos que os parâmetros R-work e R-free não diminuem após ciclos de refinamentos pelo programa phenix.refine para o grupo espacial P6522, no qual o conjunto foi primariamente indexado. Desconfiamos que a simetria real pode ser menor e o twinning faz com que o conjunto pareça ter uma simetria maior. Neste momento, estamos fazendo testes para definir o grupo espacial correto. A expectativa, após resolver esse caso difícil de processamento, é disponibilizar mais um exemplar da enzima ThiE, pois não há muitas estruturas experimentais resolvidas desta proteína no Protein Data Bank. Resultados preliminares animadores foram obtidos no grupo espacial P3221 e regra de twinning "-h,-k,l". O refinamento está em progresso com valores de Rwork/Rfree em torno de 0.20/0.25 no momento.

Palavras-chave: Resistência antimicrobiana. *Enterococcus faecalis*. ThiE.

Agência de fomento: CAPES (FAPESP: 2015/26722-8)

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Global action plan on antimicrobial resistance**. Geneva: WHO, 2015.
- 2 MÜLLER, I. B.; HYDE, J. E.; WRENGER, C. Vitamin B metabolism in *Plasmodium falciparum* as a source of drug targets. **Trends in Parasitology**, v. 26, n.1, p. 35–43, 2010.

3 DU, Q.; WANG, H.; XIE, J. Thiamin(Vitamin B1) biosynthesis and regulation: a rich source of anti-microbial drug targets? **International Journal of Biological Sciences**, v. 7, n. 1, p. 41-52, 2011.

PG53

Electromagnetically induced transparency in hot Rydberg atoms with polarization spectroscopy and Laguerre-Gaussian modes

GOMES, Naomy Duarte; MAGNANI, Bárbara da Fonseca; KONDO, Jorge Douglas Massayuki; MARCASSA, Luis Gustavo

naomy.gomes@usp.br

In this work, we investigate the electromagnetically induced transparency (EIT) phenomenon (1-2) in a three-level ladder of rubidium atoms at room temperature using a Rydberg state and a laser in a Laguerre-Gaussian mode. (3) The probe field, which is Gaussian, couples the $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$ states. The control field, which will be used in either Gaussian or Laguerre-Gaussian (LG) modes, couples the $5P_{3/2} \rightarrow 42D$ states. We use the polarization spectroscopy (PS) technique to measure the EIT spectrum, resulting in a dispersive signal. We show that the dispersive EIT linewidth is narrower for the LG mode than for a Gaussian mode, due to the spatial distribution of the LG profile. We implement a probe transmission model using a simplified Lindblad master equation, which reproduces well the experimental results. The PS signal, as opposed to the usual Lorentzian profile, eliminates the need to fit a curve when measuring EIT linewidths while still providing subnatural widths.

Palavras-chave: Rydberg atoms. EIT. Laguerre-Gaussian modes.

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

Referências:

- 1 FLEISCHHAUER, M.; IMAMOGLU, A.; MARANGOS, J. P. Electromagnetically induced transparency: optics in coherent media. **Reviews of Modern Physics**, v. 77, n. 2, p. 633, 2005.
- 2 MARANGOS, J. P. Electromagnetically induced transparency. **Journal of Modern Optics**, v. 45, n. 3, p. 471-503, 1998.
- 3 KIMEL, I.; ELIAS, L. R. Relations between hermite and laguerre gaussian modes. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 29, n. 9, p. 2562-2567, 1993.

PG54

Search for dark matter in very-high-energy gamma-rays with H.E.S.S. and upcoming ground-based arrays

REIS, Igor; VIANA, Aion da Escóssia Melo

igorreis@ifsc.usp.br

In the last few decades, a large number of searches have been conducted in order to detect dark matter particles, with the purpose of characterizing these particles and finally defining a proper model to describe them, expanding the current Standard Model of Particle Physics (SM). These searches have been developing in three main directions: direct detection experiments, focused on detecting dark matter particles through nuclei scattering inside the detectors; collider experiments, where it is expected to detect dark matter through its production in collision of highly energetic particles; and indirect detection experiments, focused on detecting subproduct particles from dark matter reactions, whether annihilation or decay in high density environments of the Universe, or scattering reactions with other SM particles in high energy astrophysical environments. Our focus is the indirect detection of dark matter particles through the observation of gamma-rays produced by different types of dark matter interactions in astrophysical environments. Among all possible targets, the Galactic Center region stands out as one of the most promising to harbor a sizable dark matter gamma-ray signal. Here we investigate the sensitivity of TeV gamma-ray instruments, present and future, in the Southern Hemisphere namely, H.E.S.S. (1) and CTA (2) to the detection of DM signals in the GC region. In the absence of a clear detection, we provide stringent constraints to different DM particles model candidates.

Palavras-chave: Dark Matter. Gamma-rays. Cherenkov Telescopes.

Agência de fomento: FAPESP (2021/02027-0)

Referências:

- 1 ABDALLAH, H. Search for dark matter annihilations towards the inner galactic halo from 10 years of observations with H.E.S.S. **Physical Review Letters**, v. 117, n. 11, p. 111301, 2016.
- 2 ACHARYYA, A. Sensitivity of the Cherenkov Telescope Array to a dark matter signal from the galactic centre. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2021, n. 1, p. 057–057, 2021.

PG55

Indirect search for dark matter in Dwarf Galaxies with the Southern Wide field-of-view Gamma-ray Observatory

ANDRADE, Micael Jonathan Duarte; VIANA, Aion da Escóssia Melo

micaelandrade@ifsc.usp.br

One of the biggest mysteries in astrophysics is the nature of dark matter and its properties. Among the existing particle models, Weakly Interacting Massive Particles (WIMPs), which are predicted in several beyond Standard Model theories, are one of the most prominent candidates to explain dark matter. The reason behind that is that a WIMP-type particle would reproduce naturally the relic density of dark matter observed, this fact is known as the WIMP miracle. Among the ways of searching for signals of dark matter, indirect searches refers to the detection of Standard Model particles produced by the decay or self-annihilation of dark matter particles. When the dark matter particle has masses in the GeV-TeV range, this type of search can be done through the detection of gamma rays in astrophysical objects with high density of dark matter. (1) Among the astrophysical objects searched, dwarf galaxies may not have the highest density, but since they are dominated by dark matter and relatively close to earth, they are key dark matter targets for observation. Especially if they are dwarf spheroidal galaxies, which have an older stellar population and do not have active star formation, seeing as this type of dwarf galaxy would have almost no gamma-ray emission if dark matter did not exist. This work aims to make predictions of the detectability of dark matter annihilation or decay signals from dwarf galaxies by the Southern Wide field-of-view Gammaray Observatory (SWGGO), a future observatory to be built in South America. This wide field-of-view survey instrument will be able to probe many important dark matter targets in the Southern Hemisphere. (2) The combined observation of all targets will be able to produce competitive, if not the best, limits for dark matter with masses from 500 GeV to 1 PeV.

Palavras-chave: Dark matter. Gamma-Ray astronomy. Dwarf galaxies.

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

Referências:

- 1 RINCHIUSO, L. **Study of the Galactic Center and dark matter search with H.E.S.S.**. 2019. Thèse (Doctorat) - Institut de Recherches sur les lois Fondamentales de l'Univers, Université Paris Saclay, Paris, 2019
- 2 VIANA, A. *et al.* Searching for dark matter in the galactic halo with a wide field of view TeV Gamma-ray Observatory in the Southern Hemisphere. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2019, n. 12, p. 061-061, 2019. DOI: 10.1088/1475-7516/2019/12/061.

PG56

Avaliação do perfil parasitológico de uma série de derivados indólicos como agentes antimaláricos

MOURA, Igor; ZANINI, Camila; BARBOSA, Camila de Souza; SOUZA, Guilherme; AGUIAR, Anna Caroline Campos; SCIPIONE, Luigi; PANDOLFI, Fabiana; GUIDO, Rafael

igormrmoura@usp.br

A malária é uma das doenças infecciosas mais prevalentes causadas por parasitas do gênero *Plasmodium*. Um dos tratamentos mais utilizados envolve as terapias combinadas associadas à Artemisinina e seus derivados. Entretanto, ao longo dos últimos anos é possível observar o surgimento de resistência parcial a Artemisinina.(1-2) Portanto, o desenvolvimento e o estudo de novos compostos contra o *Plasmodium* são altamente necessários. Compostos heterocíclicos contendo átomos de nitrogênio têm sido relatados como potentes inibidores de *P. falciparum*. Neste cenário, uma série atraente para investigação são os derivados de indólicos. Os compostos antiplasmodiais representativos desta classe química incluem os análogos alcaloides indólicos provindos de produtos naturais, majoritariamente.(3) Dessa forma, investigamos as propriedades antiplasmodiais de uma série de novos derivados sintéticos de compostos indólicos. Os compostos foram sintetizados conforme descrito na literatura e a atividade antiplasmodial foi avaliada em relação a um painel de *P. falciparum* sensível a cloroquina (3D7) e resistente (K1, Dd2, TM90C6B, Dd2R_DSM265 e 3D7R_MMV848) usando um ensaio de viabilidade com SYBR Green I. O efeito citotóxico foi avaliado contra as células hepatocarcinoma (HepG2) usando um ensaio de viabilidade MTT. Resultados: Avaliamos a atividade inibitória de 28 derivados indólicos contra a cepa *P. falciparum* 3D7. O composto mais potente (Neq0693) mostrou um valor IC₅₀ de 20 ± 10 nM e um índice de seletividade SI > 50. O ensaio do tempo de ação mostrou que o Neq0693 é um composto de ação rápida com atividade inibitória pronunciada sobre as formas anteriores do parasito. Em seguida, avaliamos o perfil de combinação do Neq0693 com anti-maláricos padrão. Os resultados indicaram que o Neq0693 mostrou um perfil antagônico com artesunato, atovaquona e proguanil. Ao contrário, Neq0693 mostrou um perfil aditivo em combinação com cloroquina. Finalmente, a avaliação do Neq0693 contra um painel de cepas resistentes indicou que o composto apresentava perfil de resistência cruzada com as cepas K1 (RI = 59), Dd2 (RI = 28), TM90C6B (RI = 43) e Dd2R_DSM265 (RI = 29). A combinação de Neq0693 com verapamil não reverteu o perfil de resistência, sugerindo que o mecanismo de resistência não está relacionado a bombas de efluxo, tais como PfMDR1 ou PfCRT. O composto Neq0693 é um composto de ação rápida que demonstrou promissora atividade antimalárica frente a cepa sensível a cloroquina (3D7). No entanto, os compostos mostraram um perfil de resistência cruzada contra os antimaláricos cujas cepas testadas apresentam resistência. Estas descobertas destacam a importância de uma investigação aprofundada para indicar o verdadeiro potencial de uma nova série de compostos como agentes antimaláricos.

Palavras-chave: Antiplasmodial. Indólicos. Malária.

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

Referências:

1 SHIBESHI, M. A.; KIFLE, Z. D.; ATANFIE, S. A. Antimalarial drug resistance and novel targets for antimalarial drug discovery. **Infection and Drug Resistance**, v.13, p.4047–4060, 2020. DOI:10.2147/IDR.S279433.

2 COWMAN A. F.; HEALER, J.; MARAPANA, D., MARSH, K. . Malaria: biology and disease. **Cell**, v. 167, n.3p., 610–624., 2016. DOI:10.1016/j.cell.2016.07.055.

3 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. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.8b00143>. Acesso em: 20.12.22

PG57

Estudos estruturais da enzima RmlA de *Streptococcus pneumoniae*

MORENO, Louis; NASCIMENTO, Alessandro

louis.oliveira@usp.br

Para o ano 2050, a OMS estima que a resistência bacteriana será a principal causa de morte no mundo. Nesse contexto, a pesquisa em novos potenciais antimicrobianos deve ser uma estratégia permanente no intuito de inovar na inativação de vias metabólicas cruciais para os ciclos de vida destes patógenos. O presente projeto tem como objetivo a compreensão da enzima RmlA, primeira enzima da via metabólica para a síntese da ramnose. Em diversas espécies de bactérias patogênicas tem sido demonstrado que a síntese de dTDP-L-ramnose é fundamental para viabilidade e virulência, sendo, portanto, um alvo relevante na sugestão para uma nova classe de antibióticos. Até esse momento da pesquisa, foram produzidos cristais da RmlA de *Streptococcus pneumoniae* com os respectivos ligantes. Estes cristais foram levados ao acelerador de partículas SIRIUS onde se realizou um experimento de difração de raios X e cujos resultados estão em análise. (1-3)

Palavras-chave: Enzima RmlA. Resistência bacteriana. Cristalografia.

Agência de fomento: CAPES (88887.611116/2021-00)

Referências:

- 1 AANENSEN, D. M. *et al.* Predicted functions and linkage specificities of the products of the *Streptococcus pneumoniae* capsular biosynthetic loci. **Journal of Bacteriology**, v. 189, n. 21, p. 7856-7876, 2007.
- 2 BLANKENFELDT, W. *et al.* The structural basis of the catalytic mechanism and regulation of glucose-1-phosphate thymidyltransferase (RmlA). **EMBO Journal**, v. 19, n. 24, p. 6652-6663, 2000.
- 3 GIRAUD, M-F.; NAISMITH, J. H. The rhamnose pathway. **Current Opinion in Structural Biology**, v. 10, n. 6, p. 687-696, 2000.

PG58

Funcionalização de superfícies nanoestruturadas para desenvolvimento de plataformas para sensores ópticos

MATTOS, Vicente Silva; GUIMARAES, Francisco Eduardo; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de

vicente.mattos@usp.br

O desenvolvimento de novas técnicas de detecção de moléculas de interesse nas mais diversas áreas se torna cada vez mais buscada. Esta necessidade se dá pelo interesse devido ao aparecimento de novas moléculas com formas e aplicações diferentes, novas doenças a serem diagnosticadas, novas moléculas específicas para aplicações distintas, ou pela necessidade de se detectar estas moléculas em quantidades cada vez menores. Esta necessidade se apresenta como uma janela para diversas técnicas já muito bem estabelecidas a serem aprimoradas, para terem resultados mais precisos e específicos, no menor tempo possível. (1) O presente trabalho se apresenta como uma ferramenta de aplicação nas mais diversas áreas como uma plataforma para detecção destas moléculas de interesse em quantidades e concentrações ínfimas. (2) As estruturas geradas pelos processos aqui envolvidos possuem um potencial de aplicação muito ampla, e aqui são apresentadas algumas possibilidades para tal fim. (3) Foram feitas nanoestruturas em prata através do uso de laser pulsado femtossegundo, capazes de amplificar a superfície de contato. Dadas as propriedades do material escolhido para tais superfícies (prata), efeitos de plasmon de superfície possibilitam o aumento de fluorescência pelo processo de MEF (Metal Enhanced Fluorescence) pela proximidade de fluoróforos com a superfície. Foram então preparadas superfícies de prata pura com nanoestruturas e as mesmas foram funcionalizadas com a adição de anticorpos para a spike do vírus do COVID - SARS-CoV-2(2019-nCoV); estes foram imobilizados sobre a superfície e foi feita a adição de anticorpos secundários (Alexa Fluor™ 633 goat anti-human IgG (H+L)) para ligação específica aos primários e detecção por microscopia fluorescência dos mesmos. Os principais resultados obtidos dos experimentos preliminares realizados foi a detecção da ligação anticorpo primário com o anticorpo secundário mesmo em concentrações baixíssimas do primário (0,0525 ng/ μ L). Além disso, na comparação entre as regiões com o as nanoestruturas e as regiões lisas da prata, foi obtido um aumento do sinal de aproximadamente 6,3 vezes, indicando que, além da detecção de traços vestigiais da amostra (concentração de anticorpo na concentração de ng/ μ L), as superfícies amplificaram o sinal quando comparado à regiões sem a presença da nanoestrutura.

Palavras-chave: Biossensor. Nanoestruturas. COVID.

Agência de fomento: CNPq (142417/2019-0)

Referências:

- 1 JEONG, Y. *et al.* Metal enhanced fluorescence (MEF) for biosensors: general approaches and a review of recent developments. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 111, p. 102-116, 2018.
- 2 FORT, E.; GRESILLON, S. Surface enhanced fluorescence. **Journal of Physics D: applied physics**, v. 41, n. 1, p. 013001, 2007. DOI: 10.1088/0022-3727/41/1/013001.

3 VOROBYEV, A. Y.; MAKIN, V. S.; GUO, C. Periodic ordering of random surface nanostructures induced by femtosecond laser pulses on metals. **Journal of Applied Physics**, v. 101, n. 3, 2007. DOI: 10.1063/1.2432288.

PG59

Spectroscopy study of tellurite-germane-tungsten-zinc glasses codoped with Er^{3+} and Pr^{3+}

RICALDI, José Yitzhak Aarón Chacaliaza; CALDERÓN, Gaston Lozano; HUAMAN, José Luis Clabel; RIVERA, Victor Anthony Garcia; MESSADDEQ, Younes; MAREGA JUNIOR, Euclides

jchacaliaza@usp.br

Tellurite glasses doped with rare earth ions have been the focus of research in recent years due to their applications in optical telecommunication (1-2) and the improvement of optical properties with Pr^{3+} ions doping. (3). In the present work, the glassy system $(74-x)\text{TeO}_2 - 10\text{ZnO} - 10\text{WO}_3 - 10\text{Ge}_2\text{O}_3 - 1\text{Er}_2\text{O}_3 - x\text{Pr}_2\text{O}_3$, where ($x = 0, 0.1, 0.5, 1.0$ and 1.5 mol%) was studied. The amorphous behavior of the samples was confirmed by means of X-ray diffraction, and the glass transition and crystallization temperatures were obtained by Differential Scanning Calorimetry, then the rotational and vibrational states and the phonon energy were studied by Fourier Transform Infrared and Raman spectroscopy. The effect of co-doping Er^{3+} and Pr^{3+} to improve Near Infrared (NIR) emission properties was analyzed by photoluminescence spectroscopy, in addition, the optical characterization was also carried out by UV-Vis-NIR Absorption, and the bandgaps and the Urbach energies were calculated, as well as the polarizability, these results indicated the degree of influence of the Pr^{3+} ions within the structure of the host matrix.

Palavras-chave: Glass. Rare earth ions. Physical spectroscopy.

Agência de fomento: CAPES (88887.643238/2021-00)

Referências:

- 1 MIRZA, J. *et al.* Performance evaluation of praseodymium doped fiber amplifiers. **Optical Review**, v. 28, p. 611–618, 2021. DOI: 10.1007/s10043-021-00706-z.
- 2 LUKASZEWICZ, M. *et al.* Multi-component tellurite glasses doped with erbium for multi-model temperature sensing and optical amplification. **Materials Research Bulletin**, v. 132, p. 110996-1-110996-11, 2020. DOI: 10.1016/j.materresbull.2020.110996.
- 3 KOLAVEKAR, S. B. *et al.* Synthesis of praseodymium trioxide doped lead-boro-tellurite glasses and their optical and physical properties. **Journal of Materiomics**, v. 5, p. 455-462, 2019. DOI: 10.1016/j.jmat.2019.01.010

PG60

Caracterização comparativa de esqueletos de corais do Holoceno recente e moderno

FERREIRA, Paulina; ALMEIDA, Juliana Mara Pinto de; PESSEDA, Luiz; HERNANDES, Antonio Carlos

paulina.ferreira@usp.br

Corais da ordem taxonômica Scleractinia depositam durante toda a vida exoesqueletos calcários. Embora os mecanismos moleculares de deposição ainda não sejam totalmente descritos, sabe-se que o processo está ligado ao metabolismo do animal. (1) Este estudo se vale de amostras de corais da costa brasileira coletados a diferentes profundidades: *Mussismilia hispida* (*Mh*) a 10.4m, e *Lophelia pertusa* (*Lp*) a 852m. A amostra *Lp* em particular é dividida em dois fragmentos catalogados como A e B, tratados como uma única amostra após confirmação de sua similaridade. As duas amostras de esqueletos de corais, *Mh* e *Lp*, tiveram suas idades, estruturas cristalinas e composições químicas estudadas por técnicas como datação de (^{14}C), termogravimetria (TGA), espectroscopia infravermelha por transformada de Fourier (FTIR), difração de raios-X (DRX), espectroscopia por dispersão de raios-X (EDS). Apresenta-se primeiro o resultado da análise de ^{14}C : o material de *Lp* tem idade, em anos de calendário, ~ 11950 anos (este valor representa a média de anos AP de *Lp* A e *Lp* B), enquanto o material do espécime de *Mh* tem, em anos de calendário, 22 anos. Os resultados de TGA para *Mh* e *Lp* mostram variação massa de -3.5% e -4.8%, respectivamente, entre 25°C e 550°C; o perfil de variações de massa nesse intervalo é uma queda constante marcada por perda brusca entre 260°C e 305°C, esse fenômeno sugere que a perda de massa observada até 550°C não se deve somente a vaporização de matéria orgânica mas também a presença de água estrutural. (2) A partir de 550°C ocorre variação de massa de -40% associada com a desagregação de CaCO_3 em CaO e CO_2 . Ambos os eventos observados em TGA são irreversíveis. O espectro de FTIR demonstra para ambas as amostras picos em 1080, 856, 1465, 700 e 713 cm^{-1} , catalogados como modos de vibração ν_1 , ν_2 , ν_3 e ν_4 de CO_3^{2-} . Quanto aos difratogramas de DRX, para ambas as amostras, estes revelam aragonita (Pnma, ortorrômbico), um polimorfo metaestável de CaCO_3 . Contudo, picos não identificados como CaCO_3 indicam a presença de outras fases cristalinas nas amostras, o que pode ser corroborado pelos resultados de EDS. As composições químicas de *Mh* e *Lp* compartilham Ca (>90 m%), Sr, Si, K, S e Fe, porém *Lp* apresenta ainda Ti e Mn. A presença desses elementos pode levar à formação de fases cristalinas alternativas. As reflexões não correspondentes a aragonita indicam a presença de SrCO_3 , estroncianita, em solução sólida de CaCO_3 , aragonita. Os esqueletos não apresentaram diferenças significativas de composição química ou fase cristalina, sendo esse um indicativo de pouca ação diagenética sobre a amostra mais antiga, evidência de preservação em local estável.

Palavras-chave: Estrutura cristalina. Biomineralização. Biomateriais.

Agência de fomento: CAPES (88887.601519/2021-00)

Referências:

- 1 TAMBUTTE, S. *et al.* Coral biomineralization: from the gene to the environment. **Journal of Experimental Marine Biology and Ecology**, v. 408, n. 1, p. 58–78, 2011.
- 2 KOGA, N.; NISHIKAWA, K. Mutual relationship between solid-state aragonite–calcite transformation and thermal dehydration of included water in coral aragonite. **Crystal Growth & Design**, v. 14, n. 2, p. 879–887, 2014.

PG61

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

MACHADO, Leandro Alvares; MADEIRA, Lucas; SANTARELLI, Monica Caracanhas; BAGNATO, Vanderlei Salvador; MIDDELETON-SPENCER, Holly; GALANTUCCI, Luca; BARENGHI, Carlo F.

lemachado@usp.br

Bose-Einstein condensates (BECs) produced with trapped atoms, are very well controlled quantum systems. In the literature, studies on equilibrium BEC are well-consolidated. On the other hand, when we consider BECs in the non-equilibrium regime, there is still a lot to be understood. The dynamics of out of equilibrium quantum systems, are at the frontier of knowledge. BECs are extraordinary physical systems to study quantum aspects of many-body physics. The evolution of these systems, when externally excited, present interesting properties due to its quantum character, like the collective modes and the generation of quantized vortices. (1) Even more, for strongly excited samples, BECs may reach the quantum turbulence regime. (2) Our physical system is characterized by a BEC sample confined in a harmonic oscillator trap and its externally excited by an oscillatory magnetic field that introduce perturbations and nonlinearities. Our group has several works in this direction, but always using the same approach to excite the BEC samples, that is, using a single pulse. Now, we are interested in studying these systems with separate zones excitations instead of just a single pulse. This proposal of excitation is motivated by Norman F. Ramsey experiment (3), which introduced the separate oscillatory field method to promote atomic transitions between hyperfine states of atoms and it had important applications in atomic clocks and modern interferometry. Similarly to the Ramsey's experiment, we expect that interference phenomenon should appear in our quantum many-body system. From recent results, we already noted interference phenomenon in the collective modes evolution, like Ramsey fringes. For strongly excited samples using the Ramsey-like excitation, we expect to be able to analyze the persistence of coherence in these samples, indicating if the system becomes more disordered or not with application of perturbations. Thus, the proposal of this work is the development of theoretical models and the elaboration of computer simulations that will reproduce the experiments that are currently being carried out. These theoretical studies will allow us to better understand the behavior of this system, and its response to external excitations.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensates. Quantum turbulence. Ramsey excitation.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 PETHICK, C. J.; SMITH, H.. **Bose–Einstein condensation in dilute gases** .Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- 2 MIDDLETON-SPENCER, H. A. J. *et al* . **Evidence of strong quantum turbulence in Bose Einstein condensates** .2022. Disponível em:arXiv preprint arXiv:2204.08544. Acesso em: 06.09.2022.
- 3 RAMSEY, N. F. Experiments with separated oscillatory fields and hydrogen masers. **Reviews of**

Modern Physics , v. 62, n. 3, p. 541, 1990.

PG62

Effective Hamiltonian Lasers and Strengthening the atom-field coupling via pseudo-Hermitian Hamiltonians

OLIVEIRA NETO, Flávio de; MOUSSA, Miled

foliveiraneto@usp.br

In this work we propose a method using atom-field effective interactions along with reservoir engineering techniques (1) into laser theory. (2) Our proposal consists of creating generalized operators with which we can re-write the Hamiltonian in the Jaynes-Cummings bilinear form allowing us to build an isomorphism, between the conventional field operators and those of our effective laser, that guarantees the stationary solution in this new basis to be that of the usual theory. Mapping this steady state into the Fock basis we have a new laser state, different from the coherent state, that depends on the choosing of the generalized operator, having no diffusion from cavity losses due to a particular reservoir engineering technique. Moreover, we present a strategy for strengthening the atom-field interaction through a pseudo-Hermitian Jaynes-Cummings Hamiltonian. Apart from the engineering of an effective non-Hermitian Hamiltonian, our method also relies on the accomplishment of short-time measurements on canonically conjugate variables. The resulting fast Rabi oscillations may be used for many quantum optics purposes and specially to shorten the processing time of quantum information.

Palavras-chave: Quantum optics. Laser theory. Pseudo-hermitian hamiltonians.

Agência de fomento: CAPES (88882.328726/2019-01)

Referências:

1. POYATOS, J.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, APS, v. 77, n. 23, p. 4728, 1996.
2. SCHAWLOW, A. L.; TOWNES, C. H. Infrared and optical masers. **Physical Review**, APS, v. 112, n. 6, p. 1940, 1958.

PG63

Espectroscopia ultrarrápida: técnica de excitação e prova degenerada, não degenerada, e resolvida em polarização

GARCIA, Rafael; BONI, Leonardo de

rafaelgarcia@usp.br

Este projeto de pesquisa envolve o desenvolvimento e automação de um aparato experimental de espectroscopia ultrarrápida, o qual será usado futuramente para estudos de dinâmica temporal ultrarrápida em moléculas orgânicas e compostos inorgânicos. Como por exemplo, nanocristais e vidros. O objetivo principal foi a montagem da técnica de excitação e prova (pump-probe) degenerada, ou seja, com comprimentos de onda de excitação e prova iguais, e não degenerada, com comprimentos de onda distintos. Esta, com resolução temporal em torno de 150 femtossegundos. (1) A técnica abrange uma faixa espectral de excitação ou prova larga indo do UV até o infravermelho ($0.22 - 14 \mu\text{m}$) e também é resolvida em polarização, i.e., permite o controle da polarização dos feixes de excitação e prova. Com o uso de amplificadores lock-in, é possível trabalhar com sinais de absorção transiente menores do que 0.1 mOD, permitindo utilizar baixas fluências de excitação. Essa técnica terá por objetivo, a curto prazo, o estudo da dinâmica populacional de compostos orgânicos que apresentam processos de fotoisomerização induzidos por luz, mais particularmente azoarômáticos, os quais têm uma relaxação do estado excitado para os estados fundamentais mediados por um processo de intersecção cônica. (2) Esses processos ocorrem na escala temporal de picossegundos e são muito dependentes da energia de excitação. As vertentes deste projeto são extremamente atuais e de grande importância para ciências básicas e aplicadas, uma vez que a caracterização de materiais orgânicos e inorgânicos pode trazer informações dos estados eletrônicos excitados e como esses se comportam frente à interação com campos ópticos com diferentes polarizações e não degenerados. O projeto foi recentemente expandido para comportar a construção de um amplificador óptico não-colinear com pulsos ultracurtos sub-20 fs para estudar dinâmicas ainda mais rápidas e também processos vibracionais coerentes. (3) Além disso, pretende-se implementar um feixe de prova de supercontínuo banda larga, na faixa do visível ao infravermelho próximo, sendo possível estudar o comportamento do estado excitado das amostras em toda essa região de maneira mais simplificada.

Palavras-chave: Espectroscopia . Ultrarrápida. Pump-probe.

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

Referências:

- 1 NEGRES, R. A. *et al.*, Experiment and analysis of two-photon absorption spectroscopy using a white-light continuum probe. **IEEE Journal of Quantum Electronics.**, v. 38, n. 9, p. 1205-1216, Sept. 2002.
- 2 CHANG, C.-W. *et al.*, Photoisomerization dynamics of azobenzene in solution with S1 excitation: a femtosecond fluorescence anisotropy study. **Journal of the American Chemical Society.**, v. 126, n. 32, p. 10109-10118, Aug. 2004.

3 BUCKUP, T. *et al.*, Multidimensional vibrational coherence spectroscopy. **Topics in Current Chemistry**, v.376, n.5,p.35,2018.

PG64

Influence of cytochrome P450 3A4 and membrane lipid composition on doxorubicin activity

SANTOS, Kevin Figueiredo dos; MATERON, Elsa Maria; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de

kevin@ifsc.usp.br

Drug resistance is the principal cause of chemotherapy failure, arising from several mechanisms. (1) One possible pathway is the inactivation of anticancer drugs by cytochromes P450 (CYPs), which are enzymes responsible for eliminating over 50% of clinical drugs. (2) Since CYPs are attached to endoplasmic reticulum (ER) membranes, one strategy to investigate this problem is to employ membrane models, such as Langmuir monolayers formed at the air-water interface. In this work, we studied the influence of cytochrome P450 3A4 (CYP3A4) on the interaction between doxorubicin (DOX) and Langmuir monolayers mimicking cell membranes. A Langmuir monolayer with cholesterol (Chol), 1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC), 1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphoethanolamine (DPPE), and L- α -phosphatidylinositol (PI) was used as ER membrane model. In addition, we varied Chol and PI contents to cover disorders associated with cancer cell membranes. (3) We evaluated CYP3A4 incorporation and its interaction with DOX, including in the presence of the nicotinamide adenine dinucleotide phosphate (NADPH) cofactor. DOX and NADPH effects on the membrane models were also analyzed through surface pressure-area isotherms, Brewster angle microscopy (BAM), and polarization-modulated infrared reflection-absorption spectroscopy (PM-IRRAS). Three compositions were studied in detail, representing a healthy ER cell membrane (M1) and cancerous cell membranes (M4 and M7). We found that increasing Chol fraction induced condensation and rigidity of monolayers, while PI caused expansion and increased elasticity. The incorporation of CYP3A4 depended on monolayer composition, producing a larger expansion on a condensed monolayer (M4) containing a high Chol amount and minor effects on a more expanded monolayer with a high PI fraction (M7). DOX increased the area and fluidity for all monolayers, more pronounced in M4 and decreased considerably in M7, analogously to the interaction with CYP3A4, which confirms the relevance of lipid composition. However, DOX effects diminished considerably when CYP3A4 was incorporated in the monolayers, attributed to the formation of CYP3A4-DOX complexes, according to results from PM-IRRAS measurements. Taken together, our results support the hypothesis of CYP3A4 being involved in drug resistance, which may be exploited to design strategies to enhance chemotherapy efficacy.

Palavras-chave: Cytochrome P450 3A4. Doxorubicin. Langmuir monolayers.

Agência de fomento: CAPES (88887.338523/2019-00)

Referências:

- 1 HAIDER, T. *et al.* Drug resistance in cancer: mechanisms and tackling strategies. **Pharmacological Reports**, v. 72, n. 5, p. 1125–1151, 2020.
- 2 STIPP, M. C.; ACCO, A. Involvement of cytochrome P450 enzymes in inflammation and cancer: a

review. **Cancer Chemotherapy and Pharmacology**, v. 87, n. 3, p. 295–309, 2021.

3 HILTON, K. L. F. *et al.* The phospholipid membrane compositions of bacterial cells, cancer cell lines and biological samples from cancer patients. **Chemical Science**, v. 12, n. 40, p. 13273–13282, 2021.

PG65

Caracterização de previsões coletivas: sabedoria das massas

SIQUEIRA NETO, Nilton Santos; FONTANARI, Jose Fernando

nssiqueira.neto@gmail.com

A Sabedoria das Multidões foi, inicialmente, apresentada em 1907 por Francis Galton (1822 - 1911) em seu artigo, "Vox Populi". (1) Nele, Galton analisou os dados de uma rifa onde o objetivo era adivinhar o peso de um boi e concluiu que a combinação das estimativas, por meio da mediana, resultava em uma predição melhor do que as estimativas independentes. Mesmo se tratando de um conceito centenário e tendo sido abordado em diversos best-sellers no início dos anos 2000, ainda não há uma explicação consensual para o bom desempenho das estimativas coletivas. Diferente da ideia inicial, atualmente, o interesse pela sabedoria das multidões decorre principalmente da possibilidade de combinar previsões de especialistas na esperança de que muitas mentes especializadas sejam melhores do que poucas. Em nosso projeto usamos a base de dados Pesquisa de Previsores Profissionais do Federal Reserve Bank da Filadélfia para analisar a previsão de índices econômicos por grupos de especialistas, de modo a descrever de uma forma estatisticamente confiável a precisão da estimativa coletiva na previsão desses índices. Em particular, comparamos diferentes métodos de agregação das estimativas individuais (média e mediana) e mostramos que a explicação comumente aceita para a sabedoria das multidões baseada na ideia de uma compensação de erros não é correta devido a forte assimetria da distribuição de estimativas individuais. (2)

Palavras-chave: Sabedoria das multidões. Vox expertorum. Sociofísica.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 GALTON, F. Vox Populi. *Nature*, v.75, p. 450, 1907.

2 SIQUEIRA NETO, N. S.; FONTANARI, J. F. **On the efficacy of the wisdom of crowds to forecast economic indicators**. 2022. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2207.08924.pdf>. Acesso em: 25 ago. 2022.

PG66

Núcleos Ativos de Galáxias e Galáxias Starbursts como fonte dos sinais de anisotropia dos UHECR

OLIVEIRA, Cainã de; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de

caina.oliveira@usp.br

Raios cósmicos ultra-energéticos (UHECR, *Ultra-high energy cosmic rays*) são núcleos de altíssima energia que atingem a Terra vindos do espaço. Medidas independentes dos observatórios Pierre Auger e Telescope Array apontam para sinais de anisotropia estatisticamente significantes na direção de chegada dos UHECR: uma modulação dipolar de larga escala; e, três regiões do céu com excessos locais de eventos (*hotspots*). A detecção da modulação dipolar tornou a hipótese de origem extragaláctica para estas partículas mais robusta e amplamente aceita. (1) Apesar disso, os objetos astrofísicos nos quais essas partículas são aceleradas permanecem desconhecidos. (1) Além disso, fontes próximas são favorecidas devido aos processos de perda de energia e interações com os fótons de fundo do Universo que ocorrem durante a propagação extragaláctica. (2) Combinando as medidas de anisotropias e a informação de fontes locais, podemos investigar classes de objetos astrofísicos propostos como fontes dessas partículas. Neste trabalho, realizamos simulações computacionais de propagação de UHECR utilizando o CRPropa3. (3) Investigamos duas classes de objetos propostos como fontes: núcleos ativos de galáxias (AGN, *active galactic nuclei*) e galáxias starburst (SBG, *starburst galaxies*). Seleccionamos apenas AGNs e SBGs próximos (<23 Mpc) e avaliamos os sinais de anisotropia gerados, comparando com os dados publicados pelos observatórios Pierre Auger e Telescope Array. As simulações realizadas consideram cinco núcleos injetados pela fonte (p, He, N, Si e Fe), três modelos de campo magnéticos extragalácticos, e três modelos para luminosidade das fontes. Dessa forma, é possível contemplar diversas incertezas envolvidas na modelagem astrofísica do problema. Os resultados obtidos indicam que os AGNs apresentam contribuição dominante na direção do dipolo e para os *hotspots* medidos pelo Observatório Pierre Auger. As SBGs são necessárias para explicar apenas o *hotspot* medido pelo Telescope Array.

Palavras-chave: Raios cósmicos Ultra-energéticos. Anisotropias. Fontes.

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

Referências:

- 1 BATISTA, R. A. *et al.* Open questions in cosmic-ray research at ultrahigh energies. **Frontiers in Astronomy and Space Sciences**, v. 6, n. 23, 2019. DOI: 10.3389/fspas.2019.00023.
- 2 LANG, R. G. *et al.* Revisiting the distance to the nearest ultrahigh energy cosmic ray source: Effects of extragalactic magnetic fields. **Physical Review D**, v. 102, n. 6, p. 063012-1 -063012-11, 2021 . DOI: 10.1103/PhysRevD.102.063012.
- 3 BATISTA, R. A. *et al.* CRPropa 3 - a public astrophysical simulation framework for propagating extraterrestrial ultra-high energy particles. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2016, 2016. DOI: 10.1088/1475-7516/2016/05/038.

PG67

Coherence map reconstruction using NV centers in diamonds

ANDRADE, Lucas Nunes Sales de; MUNIZ, Sérgio Ricardo

lucas.nunes.andrade@usp.br

The nitrogen-vacancy (NV) centers in diamond perform as an excellent solid-state spin system for quantum sensors due to their electronic spin properties. Its triplet ground state is easy to manipulate (using microwaves) and to optically initialize at room temperature. Many works have reported its use as a sensor for temperature, strain, electric fields (1), and mainly a sensor of magnetic fields (2-3) This work brings another use of the centers, using an engineered bulk sample of ultra-pure diamond and a home-built image protocol to reconstruct a coherence map.

Palavras-chave: Quantum metrology. Nitrogen vacancy centers. Quantum sensors.

Agência de fomento: CNPq (141453/2021-4)

Referências:

- 1 DOLDE, F. *et al.* Electric-field sensing using single diamond spins. **Nature Physics**, v. 7, n. 6, p. 459-463, 2011.
- 2 MCGUINNESS, L. P. *et al.* Quantum measurement and orientation tracking of fluorescent nanodiamonds inside living cells. **Nature Nanotechnology**, v. 6, n. 6, p. 358-363, 2011.
- 3 ACOSTA, V. M. *et al.* Diamonds with a high density of nitrogen-vacancy centers for magnetometry applications. **Physical Review B**, v. 80, n. 11, p. 115202, 2009.

PG68

Discovery of brussonol as a lead candidate for malaria

BARBOSA, Camila S.; AHMAD, Anees; MALUF, Sarah; MOURA, Igor R.; SOUZA, Guilherme E.; BURTOLOSO, Antônio C.; AGUIAR, Anna Caroline A.; GUIDO, Rafael V. C.

camilasbarbosa@ifsc.usp.br

INTRODUCTION Malaria is a parasitic disease caused by Plasmodium. The spread of artemisinin resistance is a great concern, as artemisinin-based combination therapies (ACTs) are the first- and second-line treatment in many countries. (1) Therefore, it is imperative to discover and develop new antimalarial drugs. Plant extracts are an important source of new bioactive molecules. (2) The icetexanes are a family of diterpenoids that have been isolated from terrestrial plants. Antibacterial, antiprotozoal, and antiproliferative activities⁹ have been reported for some diterpenes. In this work, we investigated brussonol and synthetic derivatives as antiplasmodial lead candidates. **METHODS** Antiplasmodial activity against multiple Plasmodium strains: determination of IC₅₀ for each compound. Cytotoxic tests using immortalized cells: cells of the human hepatocellular carcinoma cell line (HepG2) were incubated with the compounds (IC₅₀Pf < 10 μ M) for 72 h. Chemical rescue assay: evaluation of the IC₅₀ value in the presence of IPP. Speed of action: verify if brussonol has a fast- or a slow-acting antiplasmodial activity. Combination profile assays: verify if brussonol has an additive, synergic or antagonistic profile when associated with artesunate. **RESULTS** In this work, 15 brussonol derivatives were synthesized and assessed against P. falciparum. Brussonol showed attractive antiplasmodial with low cytotoxic activity (IC₅₀Pf = 16 μ M, IC₅₀HepG2 = 67 μ M, SI = 4). The most potent derivatives showed increased potency and lower cytotoxic effect compared with brussonol (IC₅₀sPf \sim 5 μ M, IC₅₀sHepG2 > 400 μ M, and SI > 70). Brussonol was selected as a representative compound of the series to assess the antiplasmodial activity profile. The resistant strains K1, Dd2, TM90C6B, and 3D7r_MMV848 were sensitive to brussonol, thereby indicating that brussonol showed no cross-resistance with standard antimalarials. Moreover, brussonol was a fast-acting inhibitor with an additive profile when associated with artesunate. Mechanism of action investigation indicated that brussonol did not interfere with the isoprenoid biosynthesis. **CONCLUSION** Brussonol represents a new molecular scaffold endowed with an attractive antiplasmodial activity profile. The biological properties of brussonol indicate that the natural product is a promising lead compound for antimalarial drug discovery.

Palavras-chave: Malaria. Natural products.. Brussonol

Agência de fomento: CAPES (88887.369957/2019-00)

Referências:

- 1 WORLD malaria report 2020: 20 years of global progress and challenges. Geneva: World Health Organization; 2020.
- 2 SIMMONS, E. M.; SARPONG, R. Structure biosynthetic relationships and chemical synthesis of the icetexane diterpenoids. **Natural Product Reports** v.26, p.1195-1217, 2009.

PG69

Simulações hemodinâmicas por meio de imagens de ressonância magnética em artérias

SOLCIA, Gustavo; PAIVA, Fernando Fernandes; PASCHOAL, André Monteiro; LEONI, Renata Ferranti

gustavo.solcia@usp.br

O avanço das técnicas de Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) possibilitou aplicações de simulações hemodinâmicas por toda rede arterial. Além disso, a busca por simulações paciente-específicas estabeleceu o uso de Imagens por Ressonância Magnética (IRM) para coletar dados tanto anatômicos quanto quantitativos. Entretanto, a melhor forma de combinar DFC com IRM ainda não é um consenso. O objetivo deste trabalho é de propor uma combinação de processamento de imagens com modelagem hemodinâmica e demonstrar aplicações em artérias cerebrais e de pescoço. Selecionamos uma angiografia de cabeça de um paciente saudável do dataset IXI (1) e uma angiografia de pescoço de um paciente com estenose da carótida comum de um estudo desenvolvido pela Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo. Para o processamento das imagens, aplicamos o filtro Non-Local Means em conjunto com a segmentação através do algoritmo k-means fornecido pela biblioteca Advanced Normalization Tools em python. Consequentemente, reconstruímos as artérias com a suavização de superfície pelo filtro de Taubin e modelagem de contorno com o software Blender. Utilizamos o software OpenFOAM (2) para simulações em regime transiente e com condições de contorno com ondas de fluxo sanguíneo e modelo de rede arterial do tipo Windkessel de três parâmetros. (3) Ambas as condições de contorno não constam na biblioteca do OpenFOAM e foram programadas pelo autor. Através desta metodologia foi possível garantir a convergência das simulações e gerar medidas de fluxo sanguíneo, pressão e tensão de cisalhamento nas paredes em regiões que seriam inacessíveis por medidas diretas ou não invasivas. A simulação realizada na bifurcação carótida se provou um ótimo modelo de teste para simulações mais complexas como as cerebrais. A simulação realizada em artérias cerebrais na região do círculo de Willis revelou efeitos hemodinâmicos interessantes para a comparação do fluxo sanguíneo contralateral e efeitos de variações anatômicas. Em estudos futuros pretendemos realizar simulações com interações entre fluido e estrutura para levar em consideração os efeitos da parede arterial.

Palavras-chave: Angiografia. Dinâmica de fluidos computacional. Processamento de imagem.

Agência de fomento: CAPES (88887.476130/2020-00)

Referências:

- 1 IMPERIAL COLLEGE LONDON. Biomedical Image Analysis Group. **IXI dataset**. 2014. Disponível em: <https://brain-development.org/ixi-dataset>. Acesso em: 06 jul. 2021.
- 2 WELLER, H. G. *et al.* A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. **Computers in Physics**, v. 12, n. 6, p. 620-631, 1998.
- 3 ZHOU, S. *et al.* A review on low-dimensional physics-based models of systemic arteries: application to estimation of central aortic pressure. **BioMedical Engineering OnLine**, v. 18, p. 41-1-41-25, 2019.

DOI: 10.1186/s12938-019-0660-3.

PG70

Fabricação de microressonadores poliméricos dopados com nanodiamantes via fotopolimerização por absorção de dois fótons

COUTO, Filipe; OTUKA, Adriano; MENDONÇA, Cleber

filipe.couto@usp.br

O centro de cor vacância de nitrogênio (NV-) em diamantes é uma interessante fonte de estados não clássicos do campo de radiação, com amplas possibilidades de aplicação em informação quântica.(1) Para explorar aplicações de tais emissores é necessária sua integração em dispositivos fotônicos capazes de controlar suas propriedades de emissão, bem como confinar e guiar os fótons gerados. Porém em muitos casos não é possível posicionar os centros de cor no volume das estruturas, apenas em sua superfície, e como consequência a interação ocorre apenas com o campo evanescente dos dispositivos.(2) Como forma de contribuir no avanço da integração dos centros NV- em dispositivos fotônicos, neste trabalho foram fabricados microrressonadores poliméricos (50 a 60 μ m de raio e 60 μ m de altura) através da técnica de fotopolimerização por absorção de dois fótons (FA2F), utilizando um fotoreste acrílico dopado com nanocristais de diamante contendo os centros NV-. Por utilizar o efeito não linear de absorção de dois fótons a técnica de FA2F permite a fabricação de estruturas 3D com resolução micrométrica (3), e uma vez que os nanodiamantes estão distribuídos no volume do fotoreste, é possível produzir estruturas onde os centros NV- estão posicionados dentro dos ressonadores e podem, portanto, interagir próximos aos pontos de máximo dos modos ressonantes da cavidade. Inicialmente foram estudados os efeitos de diferentes proporções de dopante nas estruturas fabricadas. Para fotorestes com uma proporção de 0.5 wt% a fabricação por FA2F não foi atingida. Utilizando a proporção de 0.1 wt% a fabricação se torna possível, porém com prejuízo na qualidade estrutural dos ressonadores, o que pode ser observado pela redução em até duas ordens de grandeza em seu fator de qualidade na região do infravermelho próximo, quando comparados às estruturas não dopadas. Além disso, é possível observar a presença de múltiplos emissores em uma única estrutura, quando apenas um é suficiente para a maioria das aplicações. Medidas de espectroscopia Raman confirmam a presença dos nanodiamantes em pontos específicos das estruturas fabricadas, sem alteração na estrutura polimérica. Em seguida foram testados fotorestes com menores concentrações, e para o valor de 0.01 wt% foram produzidos ressonadores que contem em média de 1 a 2 emissores por estrutura e fatores de qualidade da ordem de 10^4 , uma ordem de grandeza menor em relação às estruturas sem nanodiamantes. Medidas de absorção indicam um acréscimo de aproximadamente 0.5 cm^{-1} no coeficiente de absorção nas resinas de 0.01 wt% em relação ao fotoreste puro, na região do visível ao infravermelho próximo. Nota-se que tal aumento não explica a diminuição do fator de qualidade, indicando que a presença das nanopartículas pode influenciar o processo de fabricação. Assim, para os próximos passos serão testadas proporções ainda menores com o intuito de melhorar o fator de qualidade dos ressonadores. Por fim, o espectro de emissão das estruturas será analisado com o auxílio de um monocromador, de forma a obter resolução espectral suficiente para investigar a interação da emissão dos centros NV- com os modos ressonantes das cavidades.

Palavras-chave: Fotopolimerização por absorção de dois fótons. Fotônica.

Agência de fomento: FAPESP (2020/08715-2)

Referências:

- 1 KURTSEFER, C. *et al.* Stable solid-state source of single photons. **Physical Review Letters**, v.85, n.2,.2000. DOI:/10.1103/PhysRevLett.85.290.
- 2 RADULASKI, M. *et al.* Nanodiamond Integration with photonic devices. **Laser and Photonics Reviews**,v.13, n.8,p.180316,Aug.2019.
- 3 OTUKA, A. J. G., *et al.* Single-walled Carbon nanotubes functionalized with carboxylic acid for fabricating polymeric composite microstructures. **Journal of Nanoscience and Nanotechnology**, v. 15,n.12,2015.DOI: 10.1166/jnn.2015.10493.

PG71

Desenvolvimento de sistema óptico para iluminação de córnea utilizado em tratamento de ceratites

LAISSENER, Bruno S.

sartolaissener2@gmail.com

O projeto está situado no ramo de instrumentação voltada à oftalmologia, mais especificamente, atua como resposta ao problema vastamente conhecido das ceratites. Ceratites são definidas como infecções de córnea causadas por microorganismos que se proliferam causando danos ao tecido contaminado que aliado à falha terapêutica pode levar ao comprometimento grave da visão em 50% dos casos. (1) Uma alternativa ao tratamento farmacológico comum está relacionada à utilização do corante Rosa Bengala como mediador do processo de terapia fotodinâmica ativado por luz verde, que possui eficácia na inibição do crescimento de micro-organismos causadores da ceratite (2) atuando também sobre micro-organismos resistentes aos métodos tradicionais. Dentro deste contexto, nossa pesquisa visa criar um equipamento capaz de iluminar a região tomada pela infecção, levando em conta a preservação das demais estruturas oculares e o conforto do paciente submetido ao tratamento. De forma conjunta, possibilitamos o controle de diversos parâmetros físicos inerentes ao padrão de iluminação com o intuito de viabilizar testes relacionados a otimização do tratamento quanto aos efeitos fototerápicos. Para cumprir esse objetivo, utilizamos ferramentas de diferentes áreas do conhecimento para elaboração de um sistema opto-mecânico interfaceado por um microcontrolador capaz de modificar os parâmetros desejados pelo operador, gerando uma região de iluminação que proporciona o cenário propício para o tratamento, aferida a partir de técnicas fundamentais de avaliação de sistemas ópticos. Por fim, um controle auxiliar de posicionamento e monitoramento do tratamento é viabilizado por meio da aquisição e processamento de imagens via câmera embarcada.

Palavras-chave: Sistema optico. Instrumentação. Microcontrolador.

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

Referências:

- 1 JONES, D. B. Decision-making in the management of microbial keratitis. **Ophthalmology** v.88, n.8, p.814-820,1981.
- 2 SHIH, M.H.; HUANG,F. C.Effects of photodynamic therapy on rapidly growing nontuberculous mycobacteria keratitis. **Investigative Ophthalmology & Visual Science** v. 52, n.1,p.223-229,2011.

PG72

Searching for heavy dark matter with gamma-rays

JUSTINO, Lucca Radicce; VIANA, Aion; SIQUEIRA, Clarissa

lradicce@usp.br

The true nature of the largest matter density component of the Universe, the so-called dark matter (DM), is one of the most elusive problems of Physics. One of the primary direction for DM searches lies in the particle physics point of view, through the Weakly Interacting Massive Particles (WIMPs). These are particles with masses in the GeV – TeV range and weak-scale interaction strength. In high-density environments of the Universe, WIMPs may self-annihilate and produce a strong gamma-ray signal. Dwarf galaxies, galaxy clusters and the Galactic Center (GC) are compelling candidates to harbour such sizeable high-energy γ -ray signals. This project aims to estimate the sensitivity of future gamma-ray observatories, such as the Southern Wide field-of-view Gamma-ray Observatory (SWGGO) and the Cherenkov Telescope Array (CTA), to probe the non-canonical DM models. The first scenario analyzed is the Inert Doublet Model (IDM), which postulates an extra Higgs doublet to the Standard Model (SM). (1) This new doublet is stable due to a Z_2 symmetry which stabilizes the lightest scalar, leading to a good DM candidate, more easily detectable because of its higher cross-section. (1) We are now analyzing the capacity of the CTA and SWGGO to probe the IDM on targets like the GC and dwarf spheroidal galaxies (dSph), moving forward in the results pointed out by recent studies. (1-2)

Palavras-chave: Particle astrophysics. Gamma-ray astronomy. Dark matter.

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

Referências:

- 1 QUEIROZ, F. S.; YAGUNAY, C. E. The CTA aims at the inert doublet model. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2016, n. 02, p. 038, 2016.
- 2 DUANGCHAN, C. *et al.* CTA sensitivity on TeV scale dark matter models with complementary limits from direct detection. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics**, v. 2022, n. 05, p. 038, 2022.

PG73

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

MARTINEZ, Vinicius José; HENN, Emanuel A. L.

vinicius.martinez@usp.br

Os sistemas para estudos de átomos frios se tornaram muito complexos e mutáveis nos últimos anos, permitindo uma diversidade de temas à serem estudados e uso de inúmeras ferramentas para tal. (1) Um experimento que permite a produção de um condensado de Bose-Einstein utiliza vários feixes de luz em quase todas as direções do espaço, muitas vezes em intensidades que podem diferir por várias ordens de magnitude. Ademais, várias bobinas são usadas para controle fino dos campos magnéticos envolvidos e aplicação de radio-frequência a fim de induzir transições entre estados hiperfinos. Este mecanismo é colocado em torno de uma câmara de vácuo com pressões da ordem de 10^{-12} Torr. Assim sendo, o manuseio fino de tais amostras quânticas normalmente fica limitada pela ausência de acesso óptico e pela configuração do sistema. Uma das soluções encontrada na maioria dos sistemas experimentais atuais é dividir fisicamente os processos: aprisionamento e resfriamento ocorrem em uma câmara de vácuo e, posteriormente à obtenção da amostra quântica, os átomos são transferidos fisicamente para uma câmara ao redor, onde não há qualquer tipo de aparato que impossibilite o acesso óptico e manipulação da amostra. Existe uma infinidade de técnicas para transportar átomos, desde armadilhas magnéticas com bobinas móveis (2) até armadilhas ópticas com posição do foco móvel. Pela simplicidade de implementação, a movimentação do ponto focal de um laser de alta potência na região do infravermelho, que caracteriza uma armadilha óptica, com átomos aprisionado no ponto focal é mais usada. Esta técnica de forma simples é composta por uma lente que focaliza o feixe de luz da armadilha e se move pela distância que se deseja mover o ponto focal, ou seja, a distância de transporte dos átomos. Quase sempre as distâncias são da ordem de dezenas de centímetros até pouco mais de um metro e, de fato, existem transladores lineares comerciais que fazem esta movimentação de forma precisa, reproduzível e programável. Todavia, é consenso que quanto maior a distância a ser movimentada, maiores são os requisitos de estabilidade, precisão e maior a necessidade de espaço físico, pois os transladores precisam pelo menos da mesma distância para atuar. Portanto, estratégias que permitam reduzir o uso do espaço e a distância de translação do sistema óptico são desejáveis. Em um trabalho recente, Lee e colaboradores (3) demonstraram o uso de um sistema de transporte óptico a partir de um *optically Compensated Zoom Lens* (OCZ). Neste trabalho eles demonstram a partir de simulações e caracterizam experimentalmente que é possível deslocar o ponto focal do sistema óptico de cerca de 1.5 m movimentando o conjunto de lentes por apenas 7 cm, simplificando os processos de movimentação. Portanto o objetivo neste trabalho estamos implementando e caracterizando totalmente um sistema de translação de átomos de Disprósio em uma armadilha óptica usando para isso um sistema de OCZ especificamente desenhado para o nosso laboratório. Este mestrado teve início em março de 2021, no momento estamos fazendo coleta de dados para finalizar a caracterização.

Palavras-chave: Lente de zoom opticamente compensada. Transporte de átomos. Disprósio.

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

Referências:

- 1 BLOCH, J.; DALIBARD, J.; ZWEGRGER, W.. Many-body physics with ultracold gases. **Reviews of Modern Physics**, v.80, n.3, p.885, Sept.2008.
- 2 HANDEL, S. *et al.* Magnetic transport apparatus for the production of ultracold atomic gases in the vicinity of a dielectric surface. **Review of Scientific Instruments** v.83, n.1, p.013105, 2012.
- 3 LEE, J. H. *et al.* Transporting cold atoms using an-optically compensated zoom lens. **Physical Review A**, v.102, n.6, p.063106, Dec.2020.

PG74

Simulation of plasmonic nanostructures for polarization control/selection of the emission of Er^{3+} in tellurite glasses

CALDERÓN, Gaston Lozano; MAREGA JUNIOR, Euclydes

glozano@usp.br

Polarization is a critical degree of freedom in a variety of optical components, especially in information technologies. As these components become smaller, polarization controlling and monitoring must be designed in such dimensions. In this context, plasmonics provides a powerful way to manipulate light on the nano-scale. Plasmonic nanostructures fabricated in metallic thin films on dielectric substrates are employed to change polarization states at such scale (1) with high light confinement. Furthermore, the development of glasses doped with rare-earth ions promises to cover a wide range of applications, one of them being optical communications using Er^{3+} . In this research, bull's eyes nanostructures were simulated with the finite-difference time-domain method for controlling and selecting polarization states of the Er^{3+} : $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ emission (centred at 545 nm). The refractive index data were obtained from a tellurite glass doped with Er^{3+} , and the nanostructures were made on a gold thin film. Polarization states were characterized by the Stokes formalism, giving a quantum optical approach. Linear-to-linear and linear-to-circular polarization were obtained by modifying the geometry of such nanostructures. Therefore, our plasmonic system can be implemented for photonic and signal processing applications.

Palavras-chave: Bull's eye. Plasmonics. Stokes.

Agência de fomento: FAPESP (2020/04835-3)

Referências:

1 KIM, J. *et al.* Controlling the polarization state of light with plasmonic metal oxide metasurface. **ACS Nano**, v. 10, n. 10, p. 9326-9333, 2016.

PG75

Investigações para promoção do controle da pneumonia por ação fotodinâmica

LIMA, Isabelle Almeida de; BAGNATO, Vanderlei Salvador

isabelle.almeida@ifsc.usp.br

A pneumonia é uma infecção caracterizada pela inflamação dos alvéolos estando entre as principais causas de morbimortalidade, devido principalmente a dificuldade de se encontrar tratamentos eficazes frente ao aumento dos microrganismos resistentes a antibióticos. A Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana (TFDa) apresenta-se como potencial alternativa, devido sua alta eficiência antimicrobiana e ação não-específica com foco em múltiplos alvos moleculares, seletividade ao local de tratamento e caráter não invasivo. Estudos realizados por nosso grupo relataram a eficiência e segurança de um protocolo para fotoinativação de *Streptococcus pneumoniae in vitro*, bem como a entrega de luz (infravermelho – 808nm) e fotossensibilizador (Indocianina Verde – ICG) em modelo animal. No entanto, a redução de microrganismos *in vivo* ainda apresenta desafios a serem contornados, devido à presença do surfactante pulmonar. (1) Uma estratégia promissora consiste no uso de veículos como os compostos de perfluorocarbono (PFCs), que possuem alto poder de disseminação, promovendo distribuição mais uniforme dos materiais administrados, além de apresentarem alta solubilidade de oxigênio, que é extremamente vantajoso para TFDa. Entretanto, estes compostos, como o 1-bromoperfluorooctano (PFB) apresentam características lipo-hidrofóbicas que limitam sua interação com fármacos, sendo necessário o uso de emulsificantes para garantir a entrega adequada dos medicamentos. (2) Desta forma, o presente trabalho tem por objetivo obter formulações empregando PFB e ICG, com diferentes emulsificantes, como a lecitina e Pluronic®. Inicialmente, foram realizados ensaios de TFDa empregando ICG a 10 μ M, lecitina a 5% (m/v) e diferentes concentrações de PFB (50, 60, 70 e 80% (v/v)), na presença de 5% (v/v) do surfactante pulmonar clínico Surventa®, e dose de luz de 20 J/cm². Nestas condições, foi possível observar a redução total de *S. pneumoniae* para as concentrações de PFB acima de 60% (v/v). Entretanto, apenas a 50% (v/v) houve emulsificação das fases, que seria o interesse inicial. Assim, considerando a concentração de 60% (v/v) PFB, foi verificado se a alteração da porcentagem de lecitina resultaria na formação da emulsão, mas observou-se que mesmo variando este parâmetro, ainda permaneciam duas fases imiscíveis. Além da lecitina, tem sido proposto o uso de Pluronic® F-127, que permitiu a obtenção de formulações a partir de diferentes concentrações (0.08 a 5% (m/v)) mesmo com elevada porcentagem de PFB. Dentre as concentrações testadas, apenas a 0.08% (v/v) de Pluronic® observou-se uma pequena redução microbiana. Entretanto, notou-se que no grupo controle (apenas ICG livre) não houve inibição total da TFDa pelo Surventa® como esperado, indicando possível degradação deste surfactante. Este interessante fato tem sido alvo de estudos recentes, indicando uma possível alternativa a ser empregada. Uma vez que o surfactante pulmonar é constantemente produzido, uma leve degradação poderia ocasionar menor afinidade do mesmo pela molécula da ICG, permitindo assim que esta alcançasse o alvo microbiano, sem danos ao paciente. (3) Assim, tendo em vista o potencial de formulações empregando PFB, os próximos estudos se concentrarão em entender o funcionamento e as interações do surfactante pulmonar com a ICG, bem como em otimizar os parâmetros para que haja liberação de forma adequada do fotossensibilizador, ajustando-se a concentração dos componentes, além da metodologia empregada.

Palavras-chave: Pneumonia. Terapia fotodinâmica. Indocianina verde.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 KASSAB, G. *et al.* Lung surfactant negatively affects the photodynamic inactivation of bacteria – *in vitro* and molecular dynamic simulation analyses. **Proceedings of the National Academy Sciences of the United States of America**. v. 119, n. 25, p.e2123564119, Apr. 2022.

2 EHMER, H. Perfluorocarbon compounds as vehicles for pulmonary drug delivery. **Expert Opinion on Drug Delivery**, v. 4, n.3, p.247-262, May 2007.

3 SHAH, M. R. Nanocarrier-based target pulmonary delivery: novel approaches for effective lung cancer treatment. **Nanocarriers for Cancer Diagnosis and Targeted Chemotherapy**. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816773-1.00006-7>. Acesso em: 09.09.22.

PG76

Structural and functional characterization of three key enzymes in the biosynthesis of vitamin C from *Myrciaria dubia*

SANTILLAN, Jhon Antoni Vargas; PEREIRA, Humberto D' Muniz; CABREJOS, Diego Antonio Leonardo; GARRATT, Richard; GÓMEZ, Juan Carlos Castro

jvargas17@usp.br

Myrciaria dubia (Kunth) McVaugh, known as camu-camu or aracá, is a fruit native to the Amazon, characterized by its high content of L-Ascorbic Acid (Vitamin C or AsA). (1) For this reason, the enzymes that participate in AsA biosynthesis (2-3) may have potential biotechnological applications for the artificial production of AsA. (1) However, up until now the structural biology of these enzymes has been poorly explored. Here, we describe the biophysical, functional, and structural properties for three enzymes of the Smirnoff/Wheeler pathway (MdGME, MdGDH and MdGalDH). All enzymes were purified by affinity chromatography followed by molecular exclusion. L-GDP-D-mannose 3',5' epimerase (MdGME), which catalyzes a double epimerization of GDP-mannose to produce GDP-L-galactose and GDP-L-gulose, proved to be a dimer in solution and its crystal structure was solved at 1.3 Å resolution. L-galactose dehydrogenase (MdGDH) is monomeric in solution with a K_m of 0.128 mM and an optimal pH of 7. The activity of the enzyme was not affected by high concentrations of AsA as has been reported for its homolog from spinach (SoGDH). This, we show to be due to a change in pH. The crystal structure of SoGDH was solved to 1.4 and 1.75 Å in its apo and holo (NAD⁺ bound) forms respectively. The structure allows us to rationalize the use of NAD⁺ (and not NADP⁺) as the cofactor and to describe differences within the active site when compared to other aldo-keto reductases, which are related to substrate specificity. Finally, L-galacton-1,4-lactone dehydrogenase (MdGalDH), presents a K_m of 0.041 mM and an optimal pH of 8 and its crystal structure was solved at 2.4 Å. The present work contributes to a broader understanding of structure-function relationships of enzymes involved in the synthesis of vitamin C.

Palavras-chave: Crystallographic structure. Vitamin C. *Myrciaria dubia*.

Agência de fomento: CAPES (23038.011268/2020-05)

Referências:

- 1 CASTRO, J. C. *et al.* Camu-camu - *Myrciaria dubia* H. B. K. (McVaugh). In: RODRIGUES, S., SILVA, E.; BRITO, E. (ed.) **Exotic fruits** : reference guide. Amsterdam: Elsevier, 2018. 490 p.
- 2 CASTRO, J. C. *et al.* De novo assembly and functional annotation of *Myrciaria dubia* fruit transcriptome reveals multiple metabolic pathways for L-ascorbic acid biosynthesis. **BMC Genomics**, v. 16, p. 997-1-997-13, 2015. DOI: 10.1186/s12864-015-2225-6.
- 3 WHEELER, G. L.; JONES, M. A.; SMIRNOFF, N. The biosynthetic pathway of vitamin C in higher

plants. **Nature**, v. 393, n. 6683, p. 365-369, 1998.

PG77

Engenharia de septinas: quimeras envolvendo a região do coiled-coil

MAMANI, Eloy Condori; ARAÚJO, Ana Paula Ulian

eloy.cm@usp.br

As septinas são proteínas citoesqueléticas encontradas em diversos eucariotos e participam de diversos processos celulares. Uma propriedade importante das subunidades de septinas é sua capacidade de se montar em uma sequência linear específica, formando heterocomplexos hexaméricos e octaméricos, que se polimerizam em filamentos. (1) O objetivo do trabalho é avaliar a importância da região C-terminal das septinas na seleção de parceiros para interações septina-septina, através da produção de uma septina humana quimérica. A região codificante do domínio C-terminal de SEPT7, foi fusionada à região correspondente ao domínio G da SEPT9, produzindo uma quimera SEPT9G/7C. Usando essa construção, testamos se a quimera, quando co-expressa com as septinas parceiras SEPT2G e SEPT6 (na ausência de SEPT7), se agruparia em um hexâmero, indicando assim a substituição da SEPT7 por SEPT9G/7C. Nossos resultados mostram que as septinas 2-6-9/7 foram coexpressas e coeluídas como um complexo após as cromatografias de afinidade e exclusão por tamanho (Superdex 200). A caracterização deste complexo por SEC-MALS mostrou a presença de dois estados oligoméricos, um dos quais corresponde a um hexâmero. A detecção de uma montagem hexamérica, com a quimera SEPT9G/7C no lugar de SEPT7, reforça a importância da região C-terminal, a qual é predita formar estruturas coiled-coils, para a correta seletividade do parceiro de interação. Em conjunto, os resultados mostram que é possível substituir SEPT7 por SEPT9 no hexâmero, apenas pela inclusão do domínio C-terminal de SEPT7 no domínio G de SEPT9.

Palavras-chave: Septinas. Quimera. *Coiled-coils*.

Agência de fomento: FAPESP (2020/02897-1)

Referências:

1 CAVINI, I. A. *et al.* The structural biology of septins and their filaments: an update. **Frontiers in Cell and Developmental Biology**, v. 9, p. 765085-1-765085-25, Nov. 2021. DOI: 10.3389/fcell.2021.765085.

PG78

Oscilações tipo Josephson em condensados de Bose-Einstein espinoriais: uma possível detecção de simetria

DONATO, Mário Henrique Figlioli; MUNIZ, Sérgio Ricardo

mario.donato@usp.br

As junções Josephson são ingredientes essenciais em circuitos supercondutores usados em muitas tecnologias quânticas existentes. Além disso, gases quânticos atômicos ultrafrios também se tornaram plataformas essenciais para estudar a superfluidez. Nesta apresentação, exploramos a analogia entre supercondutividade e superfluidez ao apresentar um intrigante efeito causado por uma fina barreira de potencial finita em um condensado de Bose-Einstein (BEC) espinorial de geometria toroidal no regime quase unidimensional, como em nosso trabalho recentemente publicado. (1) No sistema de interesse, mostramos como que a densidade de corrente atômica que flui pelas bordas da barreira oscila de modo similar à corrente elétrica através de uma junção Josephson em um supercondutor, mas no nosso caso sem apresentar circulação resultante de corrente através barreira. Também discutimos como os estados de quebra espontânea de simetria não triviais de BECs espinoriais são capazes de modificar a estrutura dessa corrente, criando a possibilidade de detectar a simetria de um condensado espinorial apenas usando medições dessa corrente superfluida. Além disso, apresentamos uma breve discussão acerca do controle dos parâmetros do sistema (de acordo com os critérios de Landau para a superfluidez) e um *toy model* utilizando as ideias discutidas em. (1)

Palavras-chave: Efeito Josephson. Condensado de Bose-Einstein. BEC espinoriais.

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

Referências:

1 DONATO, M. H. F.; MUNIZ, S. R. Josephson-like oscillations in toroidal spinor Bose-Einstein condensates: a prospective symmetry probe. **Symmetry**, v. 14, n. 5, p. 867, 2022.

PG79

Avaliação da atividade antiplasmodial de frações fúngicas endofíticas

MENDES, Giovana Rossi; BARBOSA, Camila Souza; MOREIRA, Natália Menezes; OLIVEIRA, Caroline R.; AMORIM, Marcelo R.; BERLINCK, Roberto G. S.; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho

giquimica017@usp.br

A malária é uma doença causada pelo protozoário patogênico *Plasmodium spp.* que apresenta grande impacto global na saúde humana, devido sua alta carga de morbidade e mortalidade. (1) O aumento da resistência de cepas de *P. falciparum* a medicamentos licenciados demonstra a necessidade de descobrir novos candidatos antimaláricos. Os produtos naturais (PNs) apresentam substancial diversidade estrutural e potentes atividades biológicas e, alguns dos atuais tratamentos antimaláricos são baseados em produtos naturais (quinina e artemisinina). Assim, PNs são compostos atrativos para a descoberta de novos candidatos a drogas antimaláricas. (2) Neste trabalho, investigamos extratos de meios de crescimento produzidos por 29 linhagens de fungos endofíticos isolados de plantas coletadas na Ilha de Alcatrazes, São Sebastião (SP/BR). A extração por fase sólida (SPE, do inglês *solid phase extraction*) foi aplicada para o fracionamento de extratos solúveis em EtOAc. Em seguida, a atividade antiplasmodial das frações foi avaliada contra uma cepa sensível de *P. falciparum*. Várias frações apresentaram atividade inibitória promissora, com valores de inibição do crescimento de *P. falciparum* acima de 90%, a 50 µg/mL. Nossos achados indicaram que produtos naturais isolados de culturas de fungos endofíticos são fonte atrativa para a descoberta de novos inibidores de *P. falciparum*.

Palavras-chave: Atividade antiplasmodial. Extração por fase sólida. Frações.

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

Referências:

- 1 PHILLIPS, M. *et al.* Malaria. **Nature Reviews Disease Primers**, v. 3, p. 17050-1-17050-24, 2017. DOI: 10.1038/nrdp.2017.50.
- 2 CLARDY, J; WALSH, C. Lessons from natural molecules. **Nature**, v. 432, n. 7019, p. 829-837, 2004.

PG80

Um estudo em cordas cósmicas com um grau extra de liberdade

GREGORIO, Gustavo Moreira; HARTMANN, Betti

gustavo.gregorio@usp.br

Nos modelos de cordas cósmicas estudados, com a adição de um campo extra podemos ter uma corrente no interior da corda cósmica. Essas correntes podem ser de vários tipos, entre elas a corrente bosônica. (1) Nesse estudo vimos, analiticamente, como que se dão a presença dessas correntes nas cordas com lagrangiana da forma $U(1) \times U(1)$ ao adicionarmos um grau extra de liberdade. Observamos que, com a escolha correta de alguns parâmetros, podemos encontrar uma corrente eletromagnética sendo carregada no interior da corda, através de um condensado χ quando os campos são fracamente acoplados a si mesmos e fortemente acoplados um ao outro, corrente esta com um valor crítico muito acima dos encontrados normalmente em parâmetros terrestres. (1) Também vimos que existem casos mais gerais, onde o vortex não precisa preservar a simetria H , nesses casos podemos encontrar soluções como as cordas de 'Alice', que possuem características peculiares como fazer que partículas que sejam transportadas por ela retornem conjugadas por um operador \tilde{h} no caso do automorfismo de $H(0)$ não ser trivial. Em vários casos esse operador consiste no operador de conjugação de carga. (1)

Palavras-chave: Cordas cósmicas. Cordas supercondutoras.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 HINDMARSH, M. B.; KIBBLE, T. W. B. Cosmic strings. **Reports on Progress in Physics**, v. 58, n. 5, p. 477-562, 1995.

PG81

Study of the mechanism of viral entry inhibitors and SARS-CoV-2 pseudovirus neutralization assay in the BSL2 laboratory

PINTO, Fabio; SADRAEIAN, Mohammad; MIRANDA, Marcela; GUIMARÃES, Francisco Eduardo; DIAZ, Ricardo Sobhie; CABRAL-MIRANDA, Gustavo

fabiojr@ifsc.usp.br

During this period of activities, we worked on the generation and characterization of new SARS-Cov-2 pseudotypes for neutralization assays in convalescent plasma and monoclonal antibodies, as well as an inhibition assay for recombinant S proteins, such as ACE2 receptor blockers. This methodology made it possible to carry out serological tests of a vaccine against COVID-19 of a large number of plasma samples in vaccine trials in collaborations. We also performed neutralization assays to characterize the interaction with cells containing the ACE2 receptor protein and the subsequent internalization of the pseudo-virus were performed using UV-C radiation and the photosensitizing action of antibodies complexed with the photosensitizer PDZ. For present and future studies, we produced different pseudotypes of viral particles: basically, one containing the Luciferase-IRES-ZsGreen reporter gene, the other containing only the ZsGreen reporter gene, both containing SARS-Cov-2 envelope spike proteins and a third no spike as a control pseudovirus. (1) The morphological characterizations of the pseudovirus particles were performed by transmission electron microscopy and by DLS (Dynamic Light Scattering). Production and characterization of virus pseudotypes with coronavirus Spike fusion proteins (CoV-2) for BSL2 laboratory assays. (2)

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Pseudotyping lentiviral particles. Neutralization assay.

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

Referências:

- 1 SADRAEIAN, M. *et al.* Study of viral photoinactivation by UV-C light and photosensitizer using a pseudotyped model. **Pharmaceutics**, v. 14, n. 3, p. 683-1-683-15, 2022.
- 2 CRAWFORD, K. H. D. *et al.* Protocol and reagents for pseudotyping lentiviral particles with SARS-CoV-2 Spike protein for neutralization assays. **Viruses**, v. 12, n. 5, p. 513-1-513-15, 2020.

PG82

Classifying phenotypes using information theory

MARTINELLI, Tiago; LÁZARO, Carlos Gracia; RODRIGUES, Francisco Aparecido; MORENO, Yamir

tiago.martinelli@usp.br

Social collective phenomena involving strategic interactions are widespread in the real world often in systems having multiple types of individuals, each one with its behavior and decision-making. Typical analyses of these types of systems aim to establish general behavioral rules dictating individuals' actions. Applying an unsupervised clustering algorithm, Poncela-Casasnovas *et al.* (1) defined a comprehensive classification of the underlined strategies to a limited number of behavioral phenotypes for a lab-in-the-field experiment in which subjects face four different dyadic games, intending to establish general behavioral rules dictating individuals' actions. Here, we revisited such classification from an informational theoretical point of view. We constructed a black-box model where, given a specific round, the dyadic game and player's strategies were the input variables, and the respective payoff was the output. Such construction can be seen as an information-processing channel. Using Shannon's theory and the partial information decomposition (PID) (2-3) we computed for each phenotype's channel the mutual information followed by its decomposition into redundant, unique, and synergistic information atoms. We found empirical informational constraints classifying each phenotype. We discuss the possible interpretation of these inequalities by linking the agent's levels of rationality according to the percentage of redundant, synergistic, and unique information. This work also opens the door for a new approach to classification problems using tools from Partial Information Theory.

Palavras-chave: Game theory. Information theory. Classification problems.

Agência de fomento: FAPESP (2020/04543-2)

Referências:

- 1 PONCELA-CASASNOVAS, J. *et al.* Humans display a reduced set of consistent behavioral phenotypes in dyadic games. **Science Advances**, v. 2, n. 8, p. e1600451-1-e1600451-8, 2016.
- 2 WILLIAMS, P. L.; BEER, R. D. **Nonnegative decomposition of multivariate information**. 2010. DOI: 10.48550/arXiv.1004.2515.
- 3 YEUNG, R. W. **Information theory and network coding**. New York: Springer, 2008. 600 p.

PG83

Development of a computational model for designing the evolution of plasma scenarios in the TCABR tokamak

ASNIS, Yuri; CANAL, Gustavo

yuriasnis@gmail.com

A significant upgrade is being designed for the TCABR tokamak, which is a machine operated at the Institute of Physics of the University of São Paulo, Brazil. As part of this upgrade, two additional poloidal field (PF) coils will be installed, increasing its number of PF coils from 14 to 16. This will allow TCABR to create plasmas with a large variety of plasma shapes, including wall-limited plasmas with significant elongation, positive and negative triangularity, and squareness, as well as diverted plasmas with single-nulls, double-nulls and snowflake divertor. The creation of a plasma with a particular shape requires the prior knowledge of the evolution of each magnetic coil current. (1) In this work, we present the development of a computational model that calculates these coil current evolutions based on a small set of input parameters that must be given at specified values of time, such as plasma current, normalized beta and the location of boundary points, X-points and strike points. This model, therefore, allows for the design of the plasma evolution during the entire discharge. The core of this model consists of circuit equations that represent the electromagnetic coupling between magnetic coils, vacuum vessel and the plasma. The inclusion of the vacuum vessel in the modelling allows for a more realistic prediction of the toroidal electric field attenuation in the plasma region, the self-consistent calculation of induced vessel currents and their impact on the plasma shape, which must be somehow compensated by the PF coil current. Moreover, this model, coupled with a recently developed free-boundary kinetic equilibrium code, enables the generation of synthetic kinetic MHD equilibria for TCABR, ensuring a better estimation of the time evolution of each coil current and voltage. This work is supported by the Ministry of Science, Technology and Innovation of Brazil: National Nuclear Energy Commission - CNEN.

Palavras-chave: Tokamak. Nuclear fusion. Plasma physics.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 HOFMANN, F. FBT: a free-boundary tokamak equilibrium code for highly elongated and shaped plasmas, **Computer Physics Communications**, v. 48, n. 2, p. 207-221, Feb. 1988.

PG84

Credulidade completa e erosão da confiança em um modelo de informação enganosa

TÓRTURA, Henrique de Almeida; FONTANARI, José Fernando

henrique.tortura@usp.br

Decisões de agentes são pautadas pela sua habilidade de compreender aspectos do meio em que estão inseridos e, como uma alternativa à investigação individual, podem contar com a informação social (1) fornecida por companheiros, seguindo um comportamento imitativo. Numa perspectiva de ação coletiva, o acesso a conhecimento que leva a decisões em prol do bem comum se traduz em segurança epistêmica (2), que pode ser posta em risco quando a informação espalhada não é fidedigna. Para investigar como informações enganosas podem ameaçar a segurança epistêmica numa população que conta com informação social, desenvolvemos um modelo evolucionário baseado em teoria de jogos, no qual indivíduos devem estimar uma propriedade de seu ambiente para gerar descendentes. Tal estimativa pode ser feita explorando o ambiente ou copiando, com possíveis distorções, aquela feita por um colega. Informações enganosas foram incorporadas como uma distorção que sempre tende a uma menor chance de sobrevivência, ou seja, uma estimativa mais imprecisa. O modelo possui uma solução analítica no caso de uma população homogênea, na qual todos os agentes têm a mesma probabilidade de cópia, um parâmetro que representa a credulidade. (3) Simulações em populações heterogêneas, quando os agentes têm diferentes probabilidades de cópia e esse comportamento é transmitido para seus descendentes, indicam uma convergência para uma credulidade que não necessariamente representa a melhor chance de sobrevivência no caso homogêneo. No entanto, existem indícios que populações heterogêneas geram situações iguais àsquelas encontradas em homogêneas: em um ambiente perigoso e com chance baixa o suficiente de copiar uma informação enganosa, a melhor estratégia se torna sempre copiar de outros indivíduos; enquanto em um ambiente de baixa periculosidade e alta distorção em informações transmitidas, a melhor estratégia é a apenas exploratória, não havendo mais compartilhamento de informação.

Palavras-chave: Informação enganosa. Segurança epistêmica. Informação social.

Agência de fomento: CAPES (88887.604113/2021-00)

Referências:

- 1 AGUIÑAGA, J.; GOMULKIEWICZ, R.; WATTS, H. E. Effect of social information on an individual's assessment of its environment. **Animal Behaviour**, v. 178, p. 267-277, Aug. 2021. DOI: 10.1016/j.anbehav.2021.06.009.
- 2 SEGER, E. *et al.* **Tackling threats to informed decision-making in democratic societies : promoting epistemic security in a technologically-advanced world**. London: Alan Turing Institute, 2020. 109 p.
- 3 TÓRTURA, H. A.; FONTANARI, J. F. The synergy between two threats: disinformation

and covid-19. **Mathematical Models and Methods in Applied Sciences**, 2022. DOI: 10.1142/S021820252250049X. *In press*.

PG85

Estudo teórico do fenômeno de cavitação acústica no tecido biológico para otimização da Terapia Sonodinâmica (SDT)

ANTUNES, Camila Aparecida; PRATAVIEIRA, Sebastião

camila.antunes@ifsc.usp.br

A Terapia Sonodinâmica (SDT) é um procedimento não invasivo que pode ser utilizado na remoção de células cancerígenas. Para isso, a SDT se utiliza da combinação de ultrassom (US), uma droga sensível ao US, chamada de sonossensibilizador (SS) e oxigênio molecular (O_2). Essa combinação resulta na produção de espécies reativas de oxigênio que interagem com as células e levam à morte celular. Uma vantagem da utilização de terapias com US consiste na fácil penetração do mesmo no tecido biológico devido a sua baixa atenuação, o que permite que a SDT atinja tumores profundos. Além disso, o US pode ser altamente focado em pequenas áreas permitindo maior controle do tratamento. (1) Um dos efeitos causados pela propagação do US no tecido é a nucleação, ou seja, a formação de bolhas de gás e vapor no meio. (2) Quando tais bolhas começam a crescer e oscilar, diz-se que elas estão cavitando. (3) A dinâmica de cavitação da bolha e sua possível implosão pode ser classificada como inercial ou não inercial e resulta em efeitos para o organismo, incluindo danos celulares e teciduais. Esses fatores tornam fundamental o entendimento dos fenômenos envolvidos na cavitação acústica visando potencializar suas aplicações. Apesar disso, os modelos teóricos utilizados para descrever a cavitação não são capazes de equacionar com precisão o comportamento deste fenômeno no tecido biológico. Assim, o objetivo deste trabalho consiste em compreender os mecanismos que descrevem a nucleação e a cavitação acústica no tecido biológico, partindo da análise dos fenômenos em meios aproximadamente homogêneos. O estudo das pressões mínimas necessárias para ocorrência de nucleação e cavitação em água e no tecido biológico, e a estimativa de possíveis ajustes nos parâmetros e equações teóricas utilizadas para descrever a cavitação também serão realizados, para que tais modelos possam prever mais precisamente a interação do US com o tecido, objetivando a elaboração de um protocolo eficiente e seguro para a aplicação da SDT no tratamento do câncer de pele. Para isso, foi realizada a análise dos modelos teóricos da dinâmica de nucleação/cavitação descritos na literatura, além de simulações considerando-se parâmetros de meios aquosos e teciduais nos softwares Wolfram Mathematica e MATLAB, e testes computacionais com possíveis ajustes nos modelos analisados. A partir dos resultados obtidos com as simulações computacionais, verificou-se que a tensão superficial do meio é de grande importância para a ocorrência de nucleação e apenas a partir de ajustes em tal tensão é possível determinar com precisão os valores energéticos necessários para a formação de bolhas no tecido. Além disso, a presença de heterogeneidades no meio é capaz de reduzir significativamente a energia mínima necessária para a ocorrência de cavitação. Ademais, com pequenos acréscimos de energia, bolhas nucleadas podem implodir gerando aumentos significativos de temperatura nas proximidades e causar danos ao tecido. Desse modo, é necessário ajustar as equações teóricas para que seja possível o melhor entendimento dos parâmetros envolvidos nos processos de nucleação e cavitação de modo a se elaborar um protocolo seguro para aplicação do US no tratamento do câncer de pele.

Palavras-chave: Terapia sonodinâmica. Nucleação. Cavitação acústica no tecido biológico.

Agência de fomento: CAPES (88887.601493/2021-00)

Referências:

- 1 NENE, L. C. *et al.* Effect of ultrasonic frequency and power on the sonodynamic therapy activity of cationic Zn (II) phthalocyanines. **Journal of Inorganic Biochemistry**, v. 217, p. 111397-1-111397-12, Apr. 2021. DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2021.111397.
- 2 VLAISAVLJEVICH, E. *et al.* Effects of ultrasound frequency and tissue stiffness on the histotripsy intrinsic threshold for cavitation. **Ultrasound in Medicine & Biology**, v. 41, n. 6, p. 1651-1667, 2015.
- 3 BRUJAN, E.-A. **Cavitation in non-Newtonian fluids:** with biomedical and bioengineering applications. Heidelberg: Springer, 2011.

PG86

Otimização de geradores termoelétricos via geometria das patas termoelétricas e utilização de novos materiais

BOCCHI, João Henrique Cirilo; FARIA, Gregório Couto; PEREIRA, Gustavo Gonçalves Dalkiranis

joaohenriquebocchi@usp.br

O atual consumo de energia elétrica, globalmente, é de aproximadamente 21,371 Twh. Produzimos cerca de 17.200 vezes mais energia em um ano, do que o foi dispersado pela explosão da bomba atômica de Hiroshima. (1-2) Esse número, apesar de impressionante, só tem aumentado ano a ano. Estatísticas recentes, publicadas pela Agência Norte-Americana de Energia, projetam um crescimento de 47% da demanda energética global até 2050! O cenário é definitivamente desafiador e a crise energética global é, certamente, um dos maiores desafios que a humanidade enfrentará. Nesse sentido, tecnologias de produção de energias renováveis são imprescindíveis para termos êxito no enfrentamento desta crise desafiadora. Dentre as soluções mais estudadas, os geradores termoelétricos têm ganho muita atenção, devido ao seu baixo custo de implementação e facilidade de atuar em complementariedade com outras tecnologias de produção energética. Um gerador termoelétrico quando exposto a uma diferença de temperatura cria um fluxo de portadores de carga da zona mais quente para zona mais fria, gerando assim uma diferença de potencial entre os eletrodos. Tal fenômeno, denominado de efeito Seebeck, foi observado pela primeira vez em 1821 pelo físico Thomas Johann Seebeck, através do estudo da relação entre calor e magnetismo. Os dispositivos termoelétricos apresentam grandes vantagens como tamanhos reduzidos, compatibilidade com eletrônica flexível, operação silenciosa, índice de poluição zero e ausência de partes móveis, o que gera alta confiabilidade. No entanto, tais dispositivos ainda geram baixa eficiência de conversão térmica para elétrica, o que ainda impede sua ampla aplicação como parte da matriz energética global. (3) Para obter geradores termoelétricos de alta eficiência, esforços têm sido feitos no desenvolvimento de geometrias otimizadas, assim como, o estudo de novos materiais que apresentem propriedades termoelétricas. Neste sentido, esse trabalho tem dois principais objetivos. Primeiramente, foi realizado um estudo da influência da forma das patas termoelétricas (eletrodos) no desempenho de geradores termoelétricos. Para entender a influência da geometria das patas no desempenho de um gerador termoelétrico foram consideradas duas geometrias diferentes, preenchidas e vazadas, com áreas de seção transversal semelhantes (Fator de Preenchimento). Assim, foram realizadas simulações utilizando o método dos elementos finitos (FEM), as quais revelaram um aumento na eficiência dos dispositivos com patas vazadas em relação ao dispositivo com patas preenchidas de até 120%. Tal comportamento foi observado para patas termoelétricas com comprimento menores que 0,01mm, onde a mudança na forma das patas termoelétricas altera a distribuição de temperatura ao longo do dispositivo. Já o segundo objetivo versa sobre o estudo de novos materiais termoelétricos. Nesse sentido caracterizamos um novo material, o polímero NDI-2Tz, definindo seu Power Factor ($PF = S^2 \cdot \sigma$). Para tal, um sistema de medidas termoelétricas foi desenvolvido por completo, desde o sistema de aquisição, bem como o porta-amostra e criostato para manutenção (e variabilidade) da temperatura. Isso nos permitiu obter o coeficiente Seebeck e a condutividade elétrica do material. Os resultados aqui apresentados são os primeiros do gênero no Instituto de Física de São Carlos, e abre caminho para o desenvolvimento e fabricação de geradores termoelétricos mais eficientes.

Palavras-chave: Termoeletricidade. Gerador termoelétrico. Método dos elementos finitos.

Agência de fomento: CNPq (382153/2022-7)

Referências:

- 1 INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, **Explore energy data by category, indicator, country or region**. Paris: IEA, 2019. Disponível em: <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-tables?country=WORLD>. Acesso em: 15 ago. 2022.
- 2 UNIVERSIDADE DE BRASILIA. Laboratório de Engenharia Elétrica. Consultoria em Engenharia Elétrica. **O consumo de energia elétrica vai aumentar com o tempo ?** Brasília, DF: ENETEC. Disponível em: <https://enetec.unb.br/blog/o-consumo-de-energia-eletrica-vai-aumentar-com-o-tempo>. Acesso em: 22 ago. 2022.
- 3 SHITTU, S. *et al.* Review of thermoelectric geometry and structure optimization for performance enhancement. **Applied Energy**, v. 268, p. 115075-1-115075-31, June 2020. DOI: 10.1016/j.apenergy.2020.115075.

PG87

Estudo de chuveis atmosféricos e reconstrução de perfis longitudinais para o Cherenkov Telescope Array

GILER, Andres Gabriel Delgado; SOUZA, Vitor de; VECCHI, Manuela

andres.delgado@usp.br

O *Cherenkov Telescope Array* (CTA) será a próxima geração de telescópios de raios gama terrestres na faixa de energia desde 20 GeV até 300 TeV, oferecendo 5-10 vezes melhor sensibilidade do que os telescópios de raios gama da geração atual. (1) Cada telescópio irá capturar uma imagem da luz Cherenkov produzida pela passagem na atmosfera dos chuveis criados pelos raios gama ou raios cósmicos. A simulação de tais eventos fornece imagens que podem ser usadas para testar novos métodos e estudar a reconstrução de observáveis de chuveis iniciados por raios cósmicos. Por exemplo, o perfil longitudinal desses chuveis atmosféricos, fornece informações como a profundidade do máximo X_{\max} que pode ser usado para estudar a composição dos raios cósmicos. (2) Neste trabalho, reconstruímos o perfil longitudinal e o X_{\max} de duas espécies de raios cósmicos, próton e ferro, com energias entre 10 TeV e 300 TeV. Mostramos que usando os perfis de fótons Cherenkov obtidos dos telescópios e uma função parametrizada para a distribuição angular da luz Cherenkov em torno do eixo do chuveiro, podemos obter o perfil longitudinal e o X_{\max} . (3) Isso é diferente de outros métodos que foram tentados no passado. Assim, nosso método visa alcançar uma boa resolução na reconstrução do X_{\max} evento a evento.

Palavras-chave: *Cherenkov-Telescope-Array*. Raios-cósmicos. Chuveis-atmosféricos.

Agência de fomento: CAPES (88887.370416/2019-00)

Referências:

- 1 CHERENKOV-TELESCOPE-ARRAY CONSORTIUM. **Science with the Cherenkov Telescope Array**. Singapore: World Scientific, 2019. DOI: 10.1142/10986.
- 2 KAMPERT, K.-H.; UNGER, M. Measurements of the cosmic ray composition with air shower experiments. **Astroparticle Physics**, v. 35, n. 10, p. 660-678, May 2012. DOI: 10.1016/j.astropartphys.2012.02.004.
- 3 ARBELETCHÉ, L. B.; SOUZA, V. Parametrization of the angular distribution of Cherenkov light in air showers. **European Physical Journal C**, v. 81, n. 2, p. 195-1-195-10, Feb. 2021.

PG88

Desenvolvimento de um sistema inteligente aplicado à Agricultura de Precisão para classificação de plantas de soja e plantas daninhas em tempo real utilizando imagens multiespectrais

ODA, Yuri Sarreta; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de

yuri.oda@usp.br

Atualmente, a Agricultura de Precisão destaca-se como uma das áreas mais promissoras para o desenvolvimento de tecnologias no Brasil. Algumas tecnologias advindas dessa área incluem, por exemplo, o mapeamento de áreas de produtividade e o desenvolvimento de sensores para análises do solo, visando o uso inteligente dos recursos durante o manejo das lavouras e auxiliando o produtor durante as etapas de tomada de decisão. (1) Dentre os problemas da agricultura moderna está o uso intensivo e não localizado de herbicidas que, além de ser prejudicial ao meio ambiente, contribui com altos custos para o produtor e resulta na aplicação de produtos em organismos não desejados. (2) Visando contornar este problema, o presente projeto visa, através de métodos de Visão Computacional e Inteligência Artificial, o desenvolvimento de um sistema capaz de obter imagens de plantas em diferentes comprimentos de onda, construir imagens multiespectrais e classificar as plantas em plantas de soja ou plantas daninhas para posterior aplicação localizada de herbicidas. Para a obtenção das imagens, serão desenvolvidas duas abordagens: a primeira utilizando quatro câmeras com sensor CMOS monocromático e quatro filtros passa-banda individuais nos comprimentos de onda do vermelho (R:654-674 nm), verde (G:501-525 nm), azul (B:419-477 nm) e infravermelho próximo (NIR:761-829 nm), cobrindo a lente de cada câmera; a segunda utilizando uma câmera com sensor CMOS monocromático acoplado a um filtro multiespectral com as mesmas bandas, feito sob medida e posicionado entre o sensor e o sistema óptico da câmera. Em ambas as abordagens, as imagens serão capturadas de maneira automatizada utilizando uma estrutura com sistema de trilhos para movimentação das câmeras, e essas imagens serão utilizadas para a construção de um banco de imagens espectrais. Para o experimento inicial da primeira abordagem, o sistema de quatro câmeras espectrais e uma câmera RGB foi construído, trocando o filtro azul por um filtro infravermelho passa-alta (IR: >780 nm) devido à ausência de filtros azuis no momento, e foram posicionadas bandejas com cultivo de plantas na parte inferior da estrutura de captura, permitindo a captura de 2000 imagens para cada uma das cinco câmeras. O software CVAT foi utilizado para rotular as primeiras 300 imagens de cada câmera para a realização de treinamentos preliminares do algoritmo de detecção e classificação YOLO_v5. Os melhores resultados obtidos para a métrica *precision* foram para as imagens obtidas das câmeras IR (0,905) e RGB (0,870), sugerindo que imagens neste comprimento de onda e imagens coloridas foram mais adequadas no processo de classificação de plantas de soja e plantas daninhas. Para a métrica *recall*, os melhores resultados foram para as imagens obtidas das câmeras IR (0,893) e NIR (0,879), sugerindo que imagens espectrais de vegetação nos comprimentos de onda do infravermelho foram mais adequadas para a detecção de plantas no geral.

Palavras-chave: Agricultura de Precisão. Plantas daninhas. Inteligência artificial.

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

Referências:

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

PG89

Caracterização experimental e propriedades de condensados de Bose-Einstein fora do equilíbrio

ARMIJOS, Michelle Alejandra Moreno; BAGNATO, Vanderlei Salvador; FRITSCH, Amilson Rogelso; OROZCO, Arnol Daniel García; SAB, Sarah; TELLES, Gustavo Deczka

michelle.moreno@ifsc.usp.br

Nos últimos tempos, a caracterização de sistemas fora do equilíbrio tornou-se um dos tópicos mais notáveis em superfluidos turbulentos, e por esta razão tem sido de nosso interesse excitar um condensado de Bose-Einstein desde o equilíbrio por meio da injeção de energia e caracterizar seu estado de não equilíbrio. Foi demonstrado (1) que depois de um tempo de evolução, a energia do sistema migra para regiões de maior momento, o que é conhecido como cascata de energia, e se caracteriza por obedecer a uma lei de potência na distribuição de momento. (2) Para nosso experimento criamos um condensado de rubídio (^{87}Rb) no estado fundamental $|F = 1, m_F = -1\rangle$ aprisionado em uma armadilha magnética quadrupolar. Estudamos o comportamento da cascata de energia após permitir que o condensado excitado evolua por um certo tempo de espera na armadilha magnética, e observamos uma dependência com a quantidade de energia injetada, possivelmente atingindo um estado estacionário. Além disso, para quantificar o não equilíbrio, propomos e definimos um novo parâmetro inspirado no cálculo de resíduos (ou desvio de ajuste) da análise de regressão, que indicará o quanto o sistema está fora do equilíbrio em relação a um ajuste de uma função Gaussiana + Thomas-Fermi do perfil de densidade do condensado, para diferentes amplitudes de excitação.

Palavras-chave: Fora do equilíbrio. Turbulência. Condensado de Bose-Einstein.

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

Referências:

- 1 THOMPSON, K. J. *et al.* Evidence of power law behavior in the momentum distribution of a turbulent trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letters**, v. 11, n. 1, p. 015501-1-015501-5, Jan. 2014.
- 2 GARCÍA-OROZCO, A. D. *et al.* Intra-scales energy transfer during the evolution of turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate. **Europhysics Letters**, v. 130, n. 4, p. 46001-p1-46001-p7, May 2020.

PG90

Calibração e metodologia de medidas aplicadas ao espectrômetro de Ressonância Magnética digital (DMRS) do CIERMag

MARCOLAN, Julia; TANNÚS, Alberto

juliamarcolan@usp.br

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é empregada em áreas como medicina, indústria, agricultura, ciências de materiais, etc. As técnicas que utilizam RMN permitem, de forma não invasiva, desde investigar a estrutura molecular até traçar o perfil bioquímico de tecidos, ajudando, por exemplo, na identificação de tumores. Contudo, de acordo com um levantamento feito pelo Centro de Imagens e Espectroscopia por Ressonância Magnética (CIERMag), equipamentos comerciais de Ressonância Magnética existentes, embora práticos para o uso em diversas aplicações, são restritos a modificações drásticas. (1) Ou seja, não permitem que novas sequências de pulso ou novas formas de onda - i.e. pulsos adiabáticos - sejam introduzidos de uma maneira simples. Para solucionar este problema, o CIERMag desenvolveu um Espectrômetro de Ressonância Magnética Digital (DMRS) baseado no hardware reconfigurável das Field-Programmable Gate Array (FPGAs). Além disso, desenvolveu o software baseado no Python Magnetic Resonance Framework (PyMR) para planejamento e controle do experimento que abrange: um Integrated Development Environment (IDE), uma interface de prescrição gráfica, a Console para aquisição, organização, visualização e armazenamento de dados (2), e a linguagem primitiva "F", que conta com um compilador e um editor sensível à linguagem. (3) No contexto do CIERMag, um método representa um projeto de experimento que contém toda informação sobre ele, desde parâmetros até o processamento dos dados. Neste trabalho, foram desenvolvidos métodos para a calibração de experimentos executados no DMRS, tais como: ajuste da frequência de ressonância, do ganho do receptor e do ângulo de flip. Também foi estudada a influência da variação de temperatura da sala na frequência de operação do espectrômetro e foi calculado o tempo de relaxação transversal da água usando a sequência Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG). A linguagem "F" foi utilizada para desenvolver as sequências de pulsos, e os scripts de validação e processamento desenvolvidos em Python. Os procedimentos foram realizados no Instituto de Física de São Carlos (IFSC) utilizando um magneto permanente do tipo H com 35mm de gap. A bobina de radiofrequência utilizada tem uma região de operação ideal de 15 mm de diâmetro por 15 mm de espessura com mais de 96% de homogeneidade para uma região de 12 mm de diâmetro por 14 mm de comprimento. A intensidade do campo magnético é de 0,5463 T e opera a 23,256 MHz para núcleos do átomo de Hidrogênio (^1H). A amostra utilizada para os experimentos foi 1cm^3 de água desmineralizada. O estudo da variação da frequência de operação do espectrômetro com a temperatura da sala mostrou que, à medida que a temperatura da sala diminui, a frequência de operação aumenta. Tal relação está de acordo com o esperado, uma vez que os magnetos permanentes apresentam sensibilidade a variações de temperatura. Além disso, o valor obtido para o tempo de relaxação da água foi de $T_2 = 2,095 \pm 0,006$ s. O DMRS é uma alternativa que evita a obsolescência e torna o desenvolvimento de novas técnicas de RMN mais simples.

Palavras-chave: Ressonância-Magnética. TD-NMR. Espectrômetro.

Agência de fomento: CNPq (130161/2021-7)

Referências:

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

2 SILVA, D. M. D. D. **Desenvolvimento de console multiplataforma para aquisição, organização e visualização de dados do espectrômetro digital de RM do CIERMag** : ToRM Console. 2014. 143 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

3 COELHO, F. B. *et al.* Gerador de eventos em lógica programável - abordagem com Processador Digital de Sinais (DSP) configurável: linguagem de programação e compilador. *In* : WORKSHOP CInAPCe, 4., 2010, São Carlos. **Anais [...]**. São Carlos: IFSC, 2010. 5 p.

PG91

Controvérsias e Informações

PENA, Aurélio Bianco; SILVA, Cibelle Celestino

aurelio.pena@usp.br

As controvérsias surgem dentro da ciência a todo momento, quando analisamos os episódios históricos, notamos que elas são muito mais uma regra do que uma exceção dentro do desenvolvimento das áreas do conhecimento. Algumas vertentes filosóficas pautadas nos trabalhos de Francis Bacon e que tiveram seu último bastião no positivismo lógico do círculo de Viena defendem que elas são um problema a ser resolvido em prol de uma ciência única e completa. Outras vertentes defendem que as controvérsias são parte do processo científico e até essenciais para o desenvolvimento da ciência. Vamos usar a definição de controvérsia científica de McMullin (1): “(...) uma disputa pública e persistentemente mantida. Uma controvérsia científica diz respeito a uma questão de crença. Cada lado argumenta que o outro está errado e que eles próprios estão certos, ou pelo menos têm o melhor caso”. Além disso, essa disputa é profundamente localizada, um evento histórico com data e local, não uma simples relação entre hipóteses. (1) Isso posto, nessa apresentação vou analisar um episódio histórico da teoria da informação: a controvérsia a respeito da melhor definição de quantidade de informação entre Claude Shannon (1916-2001) e Norbert Wiener (1894-1964) no final da década de 1940 e início da década de 1950. O primeiro (2), defendia uma quantidade de informação análoga à entropia de Boltzmann, sua abordagem era tecnológica e procurava resolver os problemas de comunicação da época. O segundo (3), defendia uma quantidade de informação inversa à mesma entropia, sua abordagem era multidisciplinar e procurava criar a base para um grande campo que ele batizou de Cibernética. Através da análise dessa controvérsia pretendo mostrar que o consenso raramente é alcançado e são pelos embates, conferências e discussões gerados pelas controvérsias que a ciência se desenvolve. (1)

Palavras-chave: História da Ciência. Controvérsias científicas. Teoria da Informação.

Agência de fomento: CAPES (88887.603253/2021-00)

Referências:

- 1 MCMULLIN, E. Scientific controversy and its termination. *In*: ENGELHARDT JUNIOR, H. T.; CAPLAN, A. L. **Scientific controversies: case studies in the resolution and closure of disputes in science and technology**. Cambridge: Cambridge University Press, 1987. p. 49-92.
- 2 SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. **Bell System Technical Journal**, v. 27, n. 3, p. 379-423, July 1948.
- 3 WIENER, N. **Cybernetics: or control and communication in the animal and the machine**. Cambridge, Massachusetts: MIT Press, 1948.

PG92

Descoberta de novos inibidores para Covid-19: estudos integrados de modelagem molecular e ensaios experimentais

NOGUEIRA, Victor; GODOY, Mariana Ortiz de; FREIRE, Marjorie; SOUZA, Guilherme; FASSIO, Alexandre Victor; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho

victor.nogueira@usp.br

Ao final de 2019, células retiradas do epitélio respiratório de pacientes que vinham sofrendo de pneumonia devido a causas desconhecidas, permitiram que pesquisadores de Wuhan, na China, identificassem um novo vírus, o coronavírus da síndrome respiratória aguda grave 2 (do inglês, SARS-CoV-2), que é responsável por causar doença do Coronavírus 2019 (COVID-19). (1) Os métodos computacionais voltados para descoberta e desenvolvimento de fármacos têm sido essenciais para a coleta, o pré-processamento, a análise e a inferência de dados. Esses métodos têm desempenhado um importante papel para a descoberta de novas entidades químicas (NCE) nas últimas décadas. Neste trabalho, utilizamos métodos computacionais para a descoberta de novos potenciais inibidores para doenças infecciosas, inibidores da protease principal (M^{pro}) de SARS-CoV-2. Em março de 2020, a OMS decretou pandemia de covid-19 e isso fez com que o mundo todo mudasse drasticamente sua rotina. Diante desse contexto, nosso grupo de pesquisa buscou auxiliar na descoberta de novos candidatos a fármacos para covid-19. O SARS-CoV-2, já matou mais de 6,46 milhões de pessoas ao redor do mundo, sendo cerca de 680 mil no Brasil (dados de setembro/2022). Embora a vacina tenha melhorado o impacto da pandemia, novas variantes virais continuam a surgir e fazem com que esforços para encontrar agentes terapêuticos sejam extremamente necessários. Nesse contexto, conduzimos um estudo de triagem virtual de compostos extraídos da biodiversidade brasileira (2) para seleção e teste experimental de candidatos a inibidores da M^{pro} de SARS-CoV-2. Os 10 melhores compostos hits virtuais foram submetidos a 100 ns de simulações de dinâmica molecular para verificação da estabilidade do modo de interação e cálculo de energia livre de ligação por MM-GBSA e metadinâmica. O composto mais promissor, taxifolina (NuBBE_139), foi selecionado para avaliação experimental *in vitro* (3) contra a M^{pro} e mostrou valor de IC_{50} de 870 μM . Esses resultados indicam que abordagens computacionais integradas aos métodos experimentais são úteis e atrativas para a descoberta de novos candidatos a agentes anti-infecciosos.

Palavras-chave: SARS-CoV-2. Triagem virtual. Protease principal.

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

Referências:

- 1 ZHU, N. *et al.* A novel coronavirus from patients with pneumonia in China, 2019. **New England Journal of Medicine**, v. 382, n. 8, p. 727-733, Feb. 2020.
- 2 PILON, A. C. *et al.* NuBBEDB: an updated database to uncover chemical and biological information from Brazilian biodiversity. **Scientific Reports**, v. 7, p. 7215-1-7215-12, Aug. 2017. DOI: 10.1038/s41598-017-07451-x.

3 NOSKE, G. D. *et al.* A crystallographic snapshot of SARS-CoV-2 main protease maturation process: SARS-CoV-2 Mpro maturation. **Journal of Molecular Biology**, v. 433, n. 18, p. 167118-1-167118-16, Sept. 2021.

PG93

Coherent light-matter interaction in dense atomic clouds

FERNANDEZ, Marcia Frometa; DIAS, Pablo Gabriel Santos; MAGNANI, Pedro Henrique Nantes; AMARAL, Matheus; COURTEILLE, Philippe Wilhelm; TEIXEIRA, Raul Celistrino

mfrometa93@gmail.com

The main objective of this research is to study a particular case of the light-matter interaction: light scattering in dense samples. In dense clouds, short-range atomic interactions cannot be neglected and in these systems we would expect important variations in collective effects such as sub or super radiance. (1) In this work an experimental arrangement is proposed to obtain a dense cloud of ^{88}Sr and then study collective effects in that ensemble of atoms. The first experiments to be carried out consist in measuring the coherent transmission of a low intensity beam by the cloud. (2) For this, we will use an incident light close to the resonance with a $J = 0 \leftrightarrow J = 1$ ^{88}Sr transition. Once experimentally detected the coherent optical response of the dense cloud, we will make a comparison of the results with what it is expected by the theory based on the Coupled-Dipole Model. (3)

Palavras-chave: Light scattering. Dense atomic regime. Coupled dipole model.

Agência de fomento: CAPES (88887.338558/2019-00)

Referências:

- 1 ARAÚJO, M. O. *et al.* Superradiance in a large and dilute cloud of cold atoms in the linear-optics regime. **Physical Review Letters**, v. 117, n. 7, p. 073002-1-073002-6, Aug. 2016.
- 2 JENNEWEIN, S. *et al.* Coherent scattering of near-resonant light by a dense, microscopic cloud of cold two-level atoms: experiment versus theory. **Physical Review A**, v. 97, n. 5, p. 053816-1-053816-5, May 2018.
- 3 COURTEILLE, P. W. *et al.* Modification of radiation pressure due to cooperative scattering of light. **European Physical Journal D**, v. 58, n. 1, p. 69-73, May 2010.

PG94

Necessidade de apoio à educação especial no ensino superior com ênfase na Universidade de São Paulo

MASSON, Rafaela

rafaela.masson@ifsc.usp.br

No Brasil, após perceber-se o crescimento significativo nas matrículas da educação especial, foi lançada a política nacional de educação especial na perspectiva da inclusão, em 2008, na qual assegura sistemas educacionais inclusivos em todos os níveis de ensino. No entanto, apesar de todo respaldo aos alunos Público Alvo da Educação Especial (PAEE) existente nos últimos anos, observa-se, principalmente quando se trata do Ensino Superior, a maioria das instituições, não estão realmente preparadas para atender essa grande e importante demanda. Com o objetivo de realçar a importância da necessidade de adequação das instituições de Ensino Superior, foi realizado um levantamento estatístico, utilizando como mecanismos o Censo Escolar e o Censo de Educação Superior, ambos do INEP, (1-2) o Anuário Estatístico da USP (3) e matrículas de alunos PAEE que necessitaram de apoio durante a realização do vestibular da FUVEST, documento ofertado pela Pró-Reitoria de Graduação da Universidade. Tomando como base os documentos do INEP, foi apresentado uma análise quantitativa sobre a educação no Brasil, Região Sudeste e estado de São Paulo, tendo como principal foco relacionar o número de matrículas regulares e da educação especial na última década em todos os níveis de ensino. Após este levantamento, o recorte foi voltado para a USP, utilizando como instrumentos seu anuário estatístico e documentos disponibilizados pela Pró-Reitoria de Graduação da USP dos anos de 2015 a 2021, constando o número de alunos que realizaram o vestibular da FUVEST, necessitando de apoio durante a execução da prova e efetuaram matrícula nos cursos prestados. Durante a análises dos Censos Escolar e de Educação Superior dos anos de 2010 a 2020, é possível observar uma linearidade de matrículas em todos os níveis de ensino, enquanto o mesmo não ocorre quando se trata de alunos PAEE, principalmente em classes comuns. Quando se trata do Ensino Médio, por exemplo, em 2020, temos que cerca de 0,6% das matrículas correspondem a este público. No Ensino Superior no Brasil, temos, em 2019, esta porcentagem se repetindo e dessas, por volta de 20% correspondem ao estado de São Paulo. Sendo realizado um recorte para a USP, foi possível observar que em seu anuário estatístico não é evidenciado nenhum dado quando se trata deste público, mas com os documentos ofertados pela Pró-Reitoria de Graduação, temos que nos últimos anos cerca de 0,3% dos alunos que realizaram o vestibular da FUVEST e efetuaram matrícula são PAEE. Número que pode ser maior, tendo em vista que a partir de 2016 a USP também adotou, para alguns cursos, como forma de ingresso o SISU e que nem todos indivíduos necessitam de acomodações para a realização do vestibular. Com todo o levantamento estatístico realizado, fica evidente o crescimento de matrículas de alunos PAEE em todos os níveis de ensino, em especial no Ensino Superior, e a necessidade do cumprimento de políticas para mantimento de tais alunos na Universidade, sendo elas no âmbito estrutural, acadêmico e metodológico.

Palavras-chave: Educação especial. Ensino superior. Políticas de inclusão.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 INSTITUTO NACIONAL DE ESTUDOS E PESQUISAS EDUCACIONAIS ANÍSIO TEIXEIRA. **Sinopse estatística da educação básica 2020**. Brasília: INEP, 2021. Disponível em: <http://www.gov.br/inep/pt-br/acesso-a-informacao/dados-abertos/sinopses-estatistica/educacao-basica>. Acesso em: 09 de jul. de 2021.
- 2 INSTITUTO NACIONAL DE ESTUDOS E PESQUISAS EDUCACIONAIS ANÍSIO TEIXEIRA. **Sinopse estatística da educação superior 2019**. Brasília: INEP, 2020. Disponível em: <http://portal.inep.gov.br/basica-censo-escolar-sinopse-sinopse>. Acesso em: 11 de jul. de 2021.
- 3 UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO. **Anuário estatístico: USP 2022**. São Paulo, 2022. Disponível em: https://uspdigital.usp.br/anuario/br/acervo/AnuarioUSP_2022.pdf. Acesso em 10 de jul. de 2022.

PG95

Femtosecond laser-induced hyper-Rayleigh scattering: an frequency-resolved study of the first-order molecular hyperpolarizability of organic molecules

SANTOS, Carlos Henrique D. dos; COCCA, Leandro Henrique Zucolotto; PELOSI, André Gasparoto; VIVAS, Marcelo Gonçalves; SIQUEIRA, Jonathas de Paula; MENDONÇA, Cleber Renato; BONI, Leonardo de

c.henrique@ifsc.usp.br

Frequency-resolved nonlinear optical properties of materials are fundamental to identifying regions where the nonlinear response is more intense for use in developing photonic devices or biological applications. However, only a few studies in the literature report the first-order hyperpolarizability (β) dispersion (1), making it impossible to know the spectral behavior of molecules for possible applications, such as bioprobes and second-order nonlinear switches. Therefore, this paper describes a novel experimental optical setup of the femtosecond laser-induced Hyper Rayleigh Scattering (HRS) to determine the β spectral dependence in organic molecules. As proof of concept, five new organic molecules of cinnamylidene acetophenone derivatives were investigated. A model derived from the time-dependent perturbation theory was used to simulate the behavior of the experimental results using photophysical parameters obtained from other spectroscopic techniques, such as one (1PA) and two (2PA) photon absorption. (2) Because the derivatives exhibit a similar conjugated structure with distinct electron donor and electron-withdrawing groups attached, the experimental spectra obtained for the first-order molecular hyperpolarizability dispersion vary according to the strength of the EW or ED group inserted at the structure, as expected. The highest β value obtained near resonance was for molecule C4 β_{HRS} (750 nm) = 295 cm⁵/esu, which is approximately twice as large as molecule C1 with no EW group. Furthermore, the experimental values for dispersion of β for all molecules show excellent agreement with simulated ones using the photophysical parameters obtained from 1PA and 2PA, demonstrating the importance of computing all the components involved in the model used. Finally, through elaborating a figure of merit (FOM), it was possible to predict the values of first-order hyperpolarizability β for the wavelengths studied for the same molecular structure but with different peripheral atoms (ED or EW groups).

Palavras-chave: Dispersion of the first order hyperpolarizability. Hyper rayleigh scattering. Two-photon absorption.

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

Referências:

1 CAMPO, J.; DESMET, F.; WENSELEERS, W.; GOOVAERTS, E. Highly sensitive setup for tunable wavelength hyper-Rayleigh scattering with parallel detection and calibration data for various solvents. *Optics Express*, v. 17, p 4587, 2009.

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

PG96

Lactonas e híbridos de quinazolina e chalcona como perturbadores da dinâmica do citoesqueleto de microtúbulo

SOUZA, Matheus da Silva; SILVA, Thiago Sabino da; MASS, Eduardo Bustos; COELHO, Fernando; RUSSOWSKY, Dennis

msouza@ifsc.usp.br

Recente reporte da Agência Internacional para Pesquisa em Câncer apresenta uma previsão de que no ano de 2025 serão notificados 21.9 milhões de casos de câncer no mundo com 11.4 milhões (52%) de mortes. Os quatro cânceres sólidos mais prevalentes são os que apresentam tumor maligno no pulmão, mama feminina, intestino e próstata. (1) A invasão de células ao tecido circundante é comum na evolução tumoral e um passo inicial para a metástase. Este fenômeno requer a migração celular, a qual envolve modulação de estruturas proteicas constituintes do citoesqueleto, como por exemplo dos microtúbulos (MTs). Os MTs são polímeros intracelulares que atuam como componentes fundamentais das células eucarióticas. Avanços recentes nas técnicas de purificação de proteínas começaram a lançar luz sobre a importância das propriedades dinâmicas intrínsecas dos MTs, tais como o crescimento e o encolhimento—ambas reguladas por uma coorte de motores moleculares e proteínas associadas. Esta instabilidade dinâmica é crucial para a divisão celular e a motilidade, processos centrais que sustentam o comportamento anormal no desenvolvimento do câncer. (2) Dentro deste cenário, nos últimos três anos vem sendo realizado um projeto de doutorado intitulado “Descoberta de novos ligantes bioativos com propriedades anticâncer” (processo FAPESP 2018/25.289-7). O escopo do trabalho perpassa pelos agentes direcionados aos MTs para o tratamento dos cânceres de mama triplo-negativo e de próstata refratário à terapia hormonal—ambos os quais são metastáticos. De um conjunto inicial de trinta e cinco compostos, dez representantes sintéticos (seis lactonas e quatro híbridos de quinazolina e chalcona) foram selecionados por triagem envolvendo ensaios *in vitro* na presença e ausência de células (i e ii, respectivamente): (i) proliferação, migração, invasão e marcação nuclear com Hoechst; (ii) polimerização da tubulina e competição pelo sítio da colchicina. Os compostos apresentaram valores de $IC_{50} \leq 20 \mu M$ em linhagens tumorais de mama e/ou próstata, sendo capazes de evitar ainda o mecanismo de resistência relacionado à superexpressão da isoforma βIII da tubulina em um sistema de células humanas recombinantes. Em contrapartida, não foi observada toxicidade nas linhagens não-tumorais, tanto dos tecidos locais quanto em fibroblastos murino e humano. As dez inibiram a migração, invasão e foram responsáveis por desestabilizar a divisão celular e promover a fragmentação nuclear. A partir de ensaios direcionados ao alvo para investigação do mecanismo de ação, observou-se a inibição da polimerização da tubulina via interação alostérica com o sítio da colchicina. (3) Durante um estágio no exterior (processo FAPESP 2022/00219-1), sob supervisão da Profa. Dra. Anna Akhmanova (Universidade de Utrecht, Holanda), estou acessando *facilities* não disponíveis no Brasil para quantificar alguns parâmetros de instabilidade dinâmica dos MTs para que, ao retornar, possa haver uma análise integrada dos dados juntamente com a determinação experimental de parâmetros farmacocinéticos (eLogD/PAMPA/microsomo) e, assim, priorizar os compostos-líderes em modelos *in vivo* para prova de conceito.

Palavras-chave: Câncer. Agentes direcionados aos microtúbulos. Química medicinal.

Agência de fomento: FAPESP (2018/25.289-7)

Referências:

- 1 CAMPBELL, P.J. *et al.* Pan-cancer analysis of whole genomes. **Nature**, v. 578, p. 82-93, 2020. DOI: 10.1038/s41586-020-1969-6.
- 2 STEINMETZ, M. O.; PROTA, A. E. Microtubule-targeting agents: strategies to hijack the cytoskeleton. **Trends Cell Biology** v. 28, p.776-92, 2018. DOI: 10.1016/j.tcb.2018.05.001.
- 3 WANG, Y. *et al.* Structures of a diverse set of colchicine binding site inhibitors in complex with tubulin provide a rationale for drug discovery. **FEBS Journal**, v. 283, p. 102–111, 2016. DOI: 10.1111/febs.13555.

PG97

Descoberta de inibidores para a protease principal (nsp5) de SARS- CoV-2: Estudos estruturais e planejamento de candidatos a fármacos antivirais

GODOY, Mariana Ortiz de; SANTOS, Jhonathan; NOSKE, Gabriela Dias; GODOY, Andre de; OLIVA, Glaucius; CORREA, Arlene; GUIDO, Rafael Victorio

mortizdegodoy@usp.br

No final de 2019, houve o surgimento de um novo tipo de vírus respiratório, o coronavírus da síndrome respiratória aguda grave 2 (do inglês, SARS-CoV-2), responsável pela doença do Coronavírus 2019 (COVID-19). (1) Esse se espalhou de maneira extremamente rápida ao redor do mundo, o que fez com que a Organização Mundial de Saúde, em março de 2020, decretasse pandemia do novo Coronavírus e estimulasse, em todos os países, a adoção de medidas de contenção da disseminação da doença. Após mais de dois anos de decreto de pandemia, o COVID-19 já matou aproximadamente de 6,5 milhões de pessoas ao redor do mundo, sendo cerca de 680 mil no Brasil (dados de agosto/2022). O advento da vacinação diminuiu o impacto da pandemia, mas esforços para encontrar agentes terapêuticos ainda se fazem necessários, já que autoridades de saúde estimam que a circulação do SARS-CoV-2 se tornará permanente na população e seu genoma está em constante mutação produzindo novas variantes virais que podem afetar a eficiência das vacinas. (2) Neste contexto, uma larga triagem de compostos com potencial inibidor para a protease principal de SARS-CoV-2 (Mpro), uma proteína não-estrutural essencial para a replicação viral, foi testado. Para isso, a proteína foi clonada, expressa e purificada e ensaios de inibição de atividade foram realizados. Colaboradores de departamentos de química de diferentes universidades enviam grupos de compostos sintetizados especificamente para a inibição da Mpro, esses compostos são baseados em dados da literatura e computacionais. Até o momento, foram testados aproximadamente 1000 compostos de diferentes classes e colaboradores. O composto LSPN905 (CERSusChem/UFSCAR) mostrou inibição satisfatória (Inibição > que 80% à 20 μ M) e foi selecionado para determinação da potência inibitória, nesse ensaio o valor do IC50 foi de $12 \pm 0,4 \mu$ M, frente a esses resultados satisfatórios foi realizado o teste de Varredura diferencial Fluorimétrica (DSF) para confirmar a interação entre a molécula e a proteína e um aumento de 4 graus na TM (Temperatura de melting) confirma essa interação. A partir desses resultados, esse composto foi direcionado para estudos de cocristalização e soaking com cristais de proteína. Os cristais foram obtidos com sucesso e serão encaminhados para a coleta de dados em breve. Esses dados serão úteis para o planejamento de novos derivados mais potentes e seletivos para essa protease de SARS-CoV-2.

Palavras-chave: Mpro. SARS-Cov-2. Inibidores.

Agência de fomento: CAPES (88887.506832/2020-00)

Referências:

1 ZHU, N. *et al.* A novel coronavirus from patients with pneumonia in China, 2019. **New England**

Journal of Medicine, v. 382, n. 8, p. 727-733, Feb. 2020.

2 PHILLIPS, N. The coronavirus will become endemic. **Nature**, v. 590, p. 382-384, Feb. 2021.

PG98

Aprimorando a descrição dos decaimentos hadrônicos do lépton tau

OLIANI, Fabio; BOITO, Diogo Rodrigues

fabio.oliani@usp.br

Os momentos integrados da função espectral desempenham um papel importante nas extrações precisas de α_s a partir dos processos $\tau \rightarrow (\text{hadrons}) + \nu_\tau$ e $e^+e^- \rightarrow (\text{hadrons})$ abaixo da massa do quark c . Estes momentos são usados para definir pseudo-observáveis que irão enfatizar ou suprimir as contribuições não-perturbativas. (1) Estudamos como as singularidades no plano de Borel (renormalons) estão relacionadas com os momentos polinomiais e o comportamento perturbativo das séries assintóticas na Cromodinâmica Quântica (QCD, do inglês *Quantum Chromodynamics*). O conteúdo dos renormalons está associado com bom ou mal comportamento perturbativo da série dependendo do momento que está sendo utilizado. Usando uma transformação de esquema conveniente (esquema C) (2) em conjunto com a transformada de Borel modificada mostramos que a singularidade dominante IR na QCD torna-se um pólo simples e a estrutura matemática da transformada de Borel dos momentos polinomiais é igual tanto em QCD como no limite large- β_0 (3), sendo este limite bem descrito na literatura e utilizado como um laboratório para estudos em teoria de perturbação.

Palavras-chave: QCD. Tau. Renormalons.**Agência de fomento:** CNPq (141722/2018-5)**Referências:**

- 1 BENEKE, M.; JAMIN, M. Alpha(s) and the tau hadronic width: fixed-order, contour-improved and higher-order perturbation theory. **Journal of High Energy Physics**, v. 9, p. 44, 2008. DOI: 10.1088/1126-6708/2008/09/044.
- 2 BOITO, D.; JAMIN, M.; MIRAVITLLAS, R. Scheme variations of the QCD coupling and hadronic tau decays. **Physical Review Letters**, v. 117, n. 15, p. 152001, 2016. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.152001.
- 3 BOITO, D.; OLIANI, F. Renormalons in integrated spectral function moments and alpha(s) extractions. **Physical Review D**, v. 101, n. 7, p. 074003, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevD.101.074003.

PG99

Reconstrução da profundidade de máximo de chuueiros atmosféricos extensos utilizando uma rede neural perceptron multicamadas

VAZ, Bruna Aguiar

bruna.vaz@ifsc.usp.br

Um chuueiro atmosférico é uma cascata de partículas geradas pela interação de um raio cósmico primário de alta energia próximo ao topo da atmosfera. A profundidade de máximo (χ_{\max}) desses chuueiros é uma propriedade usada para determinar a composição dos raios cósmicos ultra-energéticos. (1) A interpretação dos dados medidos depende do conhecimento das propriedades das interações entre partículas em energias que são de difícil alcance em experimentos terrestres. A análise das partículas cósmicas pode trazer informações relevantes sobre objetos astrofísicos bem como sobre as interações elementares da natureza. Este trabalho tem como objetivo treinar uma rede neural perceptron multicamadas para reconstruir o parâmetro χ_{\max} utilizando os dados recebidos pelos detectores de fluorescência do Observatório Pierre Auger. (2) Será avaliado o desempenho da rede utilizando algoritmos de regressão e reconhecimento de padrões nos dados medidos pelo observatório, tendo o número de partículas (N) em função da profundidade atmosférica (χ) (perfil longitudinal do chuueiro) como valores de entrada para a rede. O χ_{\max} é a profundidade (χ) na atmosfera (medido em g/cm^2) onde o máximo número de partículas secundárias é atingida em um chuueiro atmosférico. Embora já utilizadas para reconstrução do χ_{\max} usando detectores de superfície (2), a aplicação de redes neurais em detectores de fluorescência permanece inédita. De acordo com os resultados obtidos, tem sido possível verificar que a acurácia da rede tem crescido a medida que o número de dados passados no treinamento aumenta, evidenciando que uma maior quantidade de dados disponível para análise torna a rede neural mais precisa e eficiente na detecção e entendimento de partículas cósmicas.

Palavras-chave: Redes neurais. Raios cósmicos. Análise de dados.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 AAB, A. *et al.* Deep-learning based reconstruction of the shower maximum X_{\max} using the water-Cherenkov detectors of the Pierre Auger Observatory. **Journal of Instrumentation**, v. 16, n. 07, p. P07019, 2021.
- 2 AAB, A. *et al.* Depth of maximum of air-shower profiles at the Pierre Auger Observatory. I. Measurements at energies above 10 17.8 eV. **Physical Review D**, v. 90, n. 12, p. 122005, 2014.

PG100

Desenvolvimento de um sistema com arquitetura em nuvem para a detecção de ceratocone subclínico por meio de *deep learning*, utilizando mapas de topografia da córnea

OLIVEIRA, Lucas Orlandi de; SIQUEIRA, Wallace Chamon Alves de; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de; TAGUCHI, Felipe Marques de Carvalho

lorlandi@usp.br

O ceratocone é uma doença degenerativa em que a córnea apresenta instabilidade estrutural ou biomecânica, causando alterações em sua forma. (1) Trata-se de uma doença que se inicia, geralmente, na adolescência e progride até a quarta década de vida, aproximadamente, podendo levar, em casos mais severos, à perda total ou parcial da visão. Apesar de não existir tratamento que regreda o estágio da doença, existem técnicas capazes de estabilizar o quadro clínico do indivíduo, como o *crosslinking*, por exemplo. Em estágios mais avançados da doença, o diagnóstico é uma tarefa simples para os especialistas da área, pois os sintomas são característicos; o desafio encontra-se, no entanto, no estágio subclínico, que é aquele em que o indivíduo não apresenta quaisquer sintomas. Os exames comumente utilizados para o diagnóstico do ceratocone são a topografia de córnea e a tomografia de Scheimpflug, que juntos fornecem as medidas de curvatura, elevação e paquimetria da córnea. Os equipamentos capazes de fornecer todas essas medidas são, no entanto, bastante caros, restringindo sua aquisição a grandes centros e hospitais. Com o surgimento do paradigma da Saúde 4.0, que está diretamente relacionado a conceitos como conectividade em nuvem, Inteligência Artificial aplicados à área da saúde para a melhoria da conectividade entre processos e da qualidade de diagnósticos, é preciso reestruturar processos já existentes, de forma a refletir os benefícios de tais melhorias à sociedade. Este projeto de pesquisa insere-se neste contexto, buscando o desenvolvimento de um sistema baseado em *deep learning*, utilizando redes neurais convolucionais, para a detecção do ceratocone em seu estágio subclínico, utilizando apenas mapas de topografia da córnea. Esse sistema será implantado em uma arquitetura em nuvem e usará, como entrada, imagens oriundas de equipamentos de diferentes fabricantes, visando ampliar o número de diagnósticos precoces realizados por clínicas e hospitais, causando impactos positivos à saúde visual da população.

Palavras-chave: Ceratocone subclínico. Deep learning. Topografia de córnea.

Agência de fomento: CAPES (88887.603275/2021-00)

Referências:

1 RABINOWITZ, Y. S. Keratoconus. **Survey of Ophthalmology**, v. 42, n. 4, p. 297-319, 1998.

PG101

On the nature of the black hole information problem

BERGAMASCHI, Thiago; BERNARDES, Esmerindo de Souza

tbergamaschi@ifsc.usp.br

One of the most interesting predictions of general relativity is that a complete gravitational collapse leads to regions where not even light can escape. Although it is still unclear what theory would be adequate to describe the interior of this region, known as a black hole, one can use the framework of general relativity to study the dynamics of bodies in its surroundings, as well as a description of geometrical quantities measured by outside observers. This description is known as the laws of black hole mechanics, which are derived based on the geometrical properties of spacetime and Einstein's equation, and appeared to have a striking similarity with the laws of thermodynamics. Through semiclassical arguments, a deeper physical connection can be made, as the geometrical quantities related in the laws of black hole mechanics can be directly associated with those appearing in the laws of thermodynamics. (1) These developments, achieved by considerations from general relativity, thermodynamics, and quantum field theory, give rise to a problem concerning the preservation of information. (2) This problem appears as one considers particle creation effects at the horizon of a black hole, which results in the emission of radiation with perfect thermal spectrum. If this evaporation process is carried out, outside observers would only have access to the mass, angular momentum and charge of the black hole, as stated by the "no-hair" theorem. Therefore, information about the initial state of the black hole would be lost. The information problem is a question of whether information is truly lost, or if there is a more adequate theory to describe the process of black hole evaporation. We aim to analyse the assumptions that led to the information problem, while searching for connections with open questions regarding the dynamical origin of the entropy of a black hole and a quantum theory of gravity. As a first step, we study the mathematical framework and physical concepts required to depict black holes. Eventually, we will analyse the effects predicted by quantum field theory in curved spacetime, and study the connection with thermodynamics in order to reformulate the problem.

Palavras-chave: General relativity. Black hole thermodynamics. Information problem.

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

Referências:

- 1 WALD, R. M. The thermodynamics of black holes. **Living Reviews in Relativity**, v. 4, n. 1, p. 6-1-6-44, Dec. 2001.
- 2 UNRUH, W. G.; WALD, R. M. Information loss. **Reports on Progress in Physics**, v. 80, n. 9, p. 092002-1-092002-8, Sept. 2017.

PG102

Estudo da markovianidade em sistemas quânticos que evoluem com mapas não-lineares

VIDOR, Clara Rodrigues; BRITO, Frederico Borges de

claravidor@usp.br

A interação com um ambiente quântico pode provocar perda de informação a respeito dos estados de um sistema. A investigação desse processo busca entender e indicar quando e como as características quânticas desejáveis são mantidas. Uma forma de descrever sistemas quânticos abertos é usar mapas com dependência temporal que evoluem o operador densidade do sistema entre dois instantes quaisquer. Porém, em alguns casos, esse mapa pode mudar de acordo com o próprio estado em que atua (1), o que cria novos desafios para o estudo dessas dinâmicas. O objetivo deste trabalho é estudar processos em sistemas abertos cuja evolução é descrita por mapas não-lineares. Para isso, definimos mapas lineares que possuem um operador densidade como parâmetro. A partir deles, podemos definir a ação de um mapa não-linear e estudar suas propriedades. Notamos que mapas CPTP dependentes de um operador densidade não precisam indicar que existe perda de informação a respeito dos estados anteriores do sistema em que atuam, diferentemente de mapas lineares dependentes apenas de instantes temporais. Isso acontece porque, dentre as duas principais definições de markovianidade (BLP e RHP), mesmo aquela que aparentemente classifica individualmente uma dinâmica (RHP) considera que é possível utilizar um mesmo mapa linear para comparar dois estados iniciais diferentes. Procuramos, então, entender se uma generalização não-linear específica do critério de markovianidade RHP ainda pode indicar perda ou ganho de memória em um sistema aberto qualquer. Para a legitimação desse parâmetro, buscamos uma medida do fluxo de informação válida para cada dinâmica isoladamente. Observamos que o crescimento ou diminuição da entropia de von Neumann de um sistema aberto não implica em queda ou aumento da markovianidade do processo. (2) Entendemos que a Markovianidade pode ser uma medida da informação dos estados anteriores do sistema e nem toda medida de informação se refere ao primeiro tipo. Portanto, para validar um critério de markovianidade não-linear, precisamos compará-lo com um indicador variação de informação necessariamente dos estados anteriores do sistema. Uma alternativa a ser investigada é quanto dos estados passados de um sistema com dissipação pode ser recuperado através do conhecimento da componente unitária da evolução. Além disso, motivados pelos resultados encontrados em (3), desejamos identificar os tipos de dependência com operadores densidade permitidas para os mapas não-lineares e todas as suas possíveis causas.

Palavras-chave: Markovianidade. Sistemas quânticos abertos. Mapas não-lineares.

Agência de fomento: CAPES (88887.637010/2021-00)

Referências:

- 1 RIVAS, A.; HUELGA, S. F. **Open quantum systems**. Berlin: Springer, 2012.
- 2 BENATTI, F.; NARNHOFER, H. Entropy behaviour under completely positive maps. **Letters in**

Mathematical Physics, v. 15, n. 4, p. 325-334, 1988.

3 BRITO, F.; WERLANG, T. A knob for markovianity. **New Journal of Physics**, v. 17, n. 7, p. 072001, 2015.

PG103

Design e modelamento de microestruturas poliméricas

PEREIRA, Victor Antonio Marques Carlos; MENDONÇA, Cleber Renato

victoramcp@usp.br

Nos últimos anos o Grupo de Fotônica do IFSC tem desenvolvido metodologias para a fabricação e funcionalização de estruturas fotônicas em polímeros e outros compostos orgânicos, utilizando pulsos laser de femtossegundos. (1) Dentre os microdispositivos ópticos, os microrressonadores do tipo whispering gallery modes (WGM) estão ganhando destaque com suas diversas aplicabilidades, como sensores por exemplo. (1-3) Entretanto, fabricar microrressonadores em polímeros é uma possibilidade pouco explorada, de modo que a maioria das publicações são baseadas em microdispositivos híbridos (estruturas poliméricas em conjunto com óxidos de silício). (2) Além disso, a dinâmica opto-térmica dos microrressonadores é importante para o controle fino de propriedades dos microrressonadores em suas aplicações, como visto em. (2) A dinâmica opto-térmica é dada pela oscilação da transmissão óptica observada nos microdispositivos quando estão em condições próximas da ressonância, sendo consequência da variação lenta das dimensões físicas dos microdispositivos devido a temperatura e da variação do índice de refração da microestrutura que pode ser tanto devido a temperatura, quanto devido à efeitos ópticos não lineares. Basicamente, quando se atinge a ressonância, ou regiões próximas, há uma queda na transmissão óptica e grande intensidade de campo confinado nos microdispositivos, de forma que ocorre aquecimento no microdispositivo e variação do índice de refração. O índice de refração varia rapidamente, variando o espectro da cavidade que passa a sair da ressonância, o que retroalimenta sua variação, que faz com que o espectro da microcavidade oscile em torno da região de ressonância, enquanto que as dimensões da estrutura variam lentamente, de forma que há regiões que não são afetadas pela variação do índice de refração e não há ressonância, o que esfria a estrutura e faz ela voltar à região onde pode haver ressonância, reiniciando o ciclo. (2-3) A dinâmica opto-térmica, ainda é uma área pouco explorada e com ausência de respostas analíticas nos modelos físicos aceitos, dado que o equacionamento da dinâmica opto-térmica chega a equações diferenciais não lineares, de modo que o problema geralmente é tratado matematicamente apenas no equilíbrio, como visto em. (3) Assim, o sistema de equações é resolvido para casos específicos, sem conclusões analíticas gerais. Desse modo, a pesquisa está desenvolvendo matematicamente a dinâmica opto-térmica dos microrressonadores, por meio de análises mais profundas de suas equações (análises de ciclo limite) para obter aproximações, prever as frequências de oscilação mecânicas e ópticas da dinâmica baseando-se em analogias com análises da mecânica clássica e da termodinâmica estatística, e conseguir demonstrar analiticamente que as oscilações realmente advêm da dilatação e contração térmica, em conjunto com a variação do índice de refração, como considerado pelos modelos físicos. Por fim, o foco final da pesquisa está em simular a dinâmica opto-térmica de microdispositivos ópticos com as condições e constantes ópticas dos materiais utilizados na fabricação de microdispositivos no Grupo de Fotônica, utilizando dos resultados gerais e dos resultados específicos, para fim de desenvolver simulações sobre os microdispositivos ópticos orgânicos e fazer previsões sobre o funcionamento dos dispositivos e otimizações nas estruturas e geometrias dos mesmos.

Palavras-chave: Microressonadores. Dinâmica opto térmica. Microestruturas.

Agência de fomento: FAPESP (2020/09022-0)

Referências:

- 1 TOMAZIO, N. B. **Direct laser writing of high-Q polymeric microresonators for photonics.** 2020. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2020.
- 2 DENG, Y. *et al.* Thermo-optomechanical oscillator for sensing applications. **Optics Express**, v. 21, n. 4, p. 4653-4664, 2013.
- 3 CARMON, T.; YANG, L.; VAHALA, K. J. Dynamical thermal behavior and thermal self-stability of microcavities. **Optics Express**, v. 12, n. 20, p. 4742-4750, 2004.

PG104

Sondando matéria escura no Sol através de raios gama

FAGIANI, Juan Vitor; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de; SIQUEIRA, Clarissa Martins

juan.fagiani@usp.br

Atualmente, é amplamente aceito que a densidade de matéria do Universo consiste principalmente de uma componente desconhecida, denominada matéria escura (ME). A qual acredita-se ser composta por uma nova partícula elementar estável, fria, neutra e não bariônica. Nas últimas décadas, houve uma intensa busca por essas partículas, especialmente os principais candidatos, como as *Weakly interacting massive particles* (WIMPs). Entretanto, não ocorreu nenhuma detecção confirmada, impondo fortes restrições a esses candidatos, especialmente por experimentos de detecção direta e colisores. Este cenário, motiva a busca por novos modelos e novas formas de procurar pela ME. (1) Nessa pesquisa abordamos justamente esse aspecto, no qual se estuda cenários modificados das WIMPs, especificamente, “mediadores de vida longa” (*long-lived mediators*), que abrem novas janelas de busca pela matéria escura. Particularmente, esses candidatos tornam viável a observação de raios gama advindos da possível aniquilação de matéria escura no núcleo de corpos celestes, como o Sol, sendo esse um canal de detecção pouco explorado e com um forte potencial de detecção. (2) Mais especificamente, determinamos o fluxo de raios gama esperado em um detector na Terra e planejamos estimar a sensibilidade para esses possíveis sinais do novo observatório de raios gama, ainda em planejamento, *The Southern Wide-field Gamma-ray Observatory* (SWGGO).

Palavras-chave: Matéria escura. Mediadores de vida longa. Sol.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 BERTONE, G.; TAIT, T. M. A new era in the search for dark matter. **Nature**, v. 562, n. 7725, p. 51–56, 2018.
- 2 LEANE, R. K.; NG, K. C.; BEACOM, J. F. Powerful solar signatures of long-lived dark mediators. **Physical Review D**, v. 95, n. 12, p. 123016, 2017.

PG105

Kondo screening across a metal-insulator transition

ALMEIDA, Igor César de; ANDRADE, Eric de Castro e

igor.almeida@ifsc.usp.br

Disorder is always present in real materials, and it may lead to inserting new physics as we break translational invariance. We are motivated by the phosphorous doped silicon (Si:P) semiconductor in this work. Each phosphorus atom contributes one extra electron to the conduction band, which moves to an impurity band close to the bottom of the conduction band. As the density of dopants increases, we observe a metal-insulator transition (MIT). Interestingly, this MIT coexists with the formation of local magnetic moments, leading to a non-trivial thermodynamic response. (1) In this work, we model this impurity band by a tight-binding model with randomly placed sites on a cubic lattice, with the hopping mediated by the insulating silicon background. We characterize the non-interacting MIT via a finite size scaling of the two-point conductance. Then, we add diluted local moments to the problem and investigate their contribution to the thermodynamics as we cross the MIT. The coupling between these magnetic moments and the impurity electrons screen these moments below the Kondo temperature T_K . Due to disorder, T_K is distributed according to a power-law at low energies, and this power law does not depend on the interaction strength between the bath and the local moments, nor on the impurity concentration. Then, we investigate the screening of two impurities, which also have a direct coupling, via the RKKY interaction and how the random singlet formation competes with the Kondo effect. We notice that the RKKY interaction modifies the power-law, attenuating the divergence as we go to larger concentrations of impurities. We construct a $T = 0$ phase diagram as a function of the magnetic couplings, Kondo and RKKY. We follow the thermodynamic responses across the MIT, connecting our results to the phenomenology of Si:P.

Palavras-chave: Efeito Kondo. Desordem. Transição metal-isolante.

Agência de fomento: FAPESP (2019/17645-0)

Referências:

1 ROSENBAUM, T. F. *et al.* Metal-insulator transition in a doped semiconductor. **Physical Review B**, v. 27, p. 7509-7523, 1983.

PG106

Development and validation of a novel analytical method for quantification of a new chromene-based molecule using RP-HPLC

MORENO, Natalia Sanchez; ZUCOLOTTI, Valtencir; FERREIRA, Natalia Noronha; SUZUKI, Isabella Luiz; BALTAZAR, Maria de Fátima Monginho; COSTA, Marta Sílvia Freitas da

natalia.smoreno@usp.br

Synthetic chromene-based molecules have proven their potential for cancer treatment, acting on several molecular targets involved in cancer progression. (1) The broad pharmacological properties of chromene derivatives are an inspiration for the design of novel drug candidates. However, some physical-chemical characteristics of chromenes such as limited solubility in an aqueous environment suggest their entrapment into polymeric delivery systems based on poly(lactide-co-glycolide) (PLGA) polymer. The development of nanotechnology-based delivery systems requires novel analytical approaches to assess loading and release capacity. Additionally, we also see great demand for analytical methods that can accurately quantify this compound. This study aimed to develop and validate a new method for quantification of a novel chromene-based molecule in nanoparticulate systems by reverse phase high-performance liquid chromatography (RP-HPLC) coupled to ultraviolet detection (HPLC-UV). The proposed method was validated following the guidelines of the International Conference on Harmonization (ICH) Q2 (R1) concerning linearity, specificity, accuracy, precision, stability, and method applicability. Chromatographic separation was performed using a C18 column (Gemini 250 × 4.6 mm, 5 μm) with the mobile phase composed of 0.5 % (v/v) acetic acid (HAc) and acetonitrile (ACN) (55:45%) on isocratic mode at a temperature of 35°C and a flow rate of 1 mL/min. All the validation parameters were within the acceptable limits. The developed method was successfully used for the first time to quantify the chromene derivative content in poly(lactide-co-glycolide)-based nanoparticles, with acceptable analytical performance and can be used in further studies applied to anticancer therapy.

Palavras-chave: HPLC. Method validation. Chromene derivatives.

Agência de fomento: CNPq (381475/2022-0)

Referências:

1 COSTA, M. *et al.* Biological importance of structurally diversified chromenes. **European Journal of Medicinal Chemistry**, v 123, p. 487-507, 2016.

PG107

Dinâmica de um condensado de Bose-Einstein turbulento

BARROS, Leonardo de; SANTARELLI, Monica Caranhas; BAGNATO, Vanderlei Salvador

wtbleonardo@usp.br

Em 2009, foi feita, em nosso grupo, a primeira alegação de se ter gerado turbulência em uma nuvem com condensação de Bose-Einstein, de átomos de Rubídio 87. (1) Desde então, o grupo tem dado ênfase em explorar as fases exóticas das nuvens atômicas, estudando seu comportamento mediante a aplicação de campos magnéticos oscilatórios adicionais ao potencial de aprisionamento. Ao se estudar a expansão livre dessas nuvens turbulentas com potencial de aprisionamento assimétrico, verificou-se um comportamento diferente do que ocorria em nuvens não turbulentas na mesma situação: enquanto nestas a expansão inverte as proporções de seus raios, no caso turbulento há a expansão de maneira aproximadamente auto-similar, ou seja, mantendo a proporção das suas dimensões. Posteriormente, métodos teóricos foram bem sucedidos em explicar a auto-similaridade com base em um modelo hidrodinâmico para a nuvem condensada, que contabiliza a energia adicional devido ao campo de velocidades dos vórtices. (2-3) Em nosso trabalho, utilizamos o método variacional para derivar novamente as equações dinâmicas que regem a evolução da nuvem condensada,, mas incluindo o termo de pressão quântica, desconsiderado em trabalhos anteriores. Para analisar as equações do nosso modelo nos baseamos no nosso sistema experimental, isto é, consideramos uma nuvem de Rubídio 87 com 10^5 átomos, sujeita a um potencial cilíndrico simétrico com eixo em z . Ao estudarmos a expansão livre da nuvem, verificamos que o termo de pressão quântica estimula a inversão das proporções, ou seja, atua contra a auto-similaridade, mas não a ponto de gerar uma expansão isotrópica ou de proporções invertidas: a proporção final dos raios é alterada em aproximadamente 25%. Tal comportamento mostra que o termo de pressão quântica, que pouco influencia a expansão livre de uma nuvem não turbulenta, passa a ser importante quando há vórtices. Isso é esperado dado que o termo é dependente do gradiente da densidade, que é grande nas regiões dos vórtices. Estudamos também o comportamento do condensado armadilhado sujeito a pequenas oscilações. Realizamos perturbações senoidais, sendo a perturbação no eixo x igual à no eixo z , e em antifase com a perturbação em y . Nesse caso, encontramos 3 modos coletivos, correspondentes ao modo quadrupolar (oscilação em anti-fase de R_z com R_x e R_y , sendo R_i o raio da nuvem no eixo i), ao modo breathing (oscilação em fase em todas as dimensões) e à precessão (oscilação em anti-fase de R_x e R_y). Percebemos que a única frequência a se alterar de maneira significativa com a vorticidade foi a do modo quadrupolar, que aumentou em aproximadamente 20% no caso em que a razão entre o número de vórtices pelo número de átomos do condensados é da ordem de 10^{-3} . Tal resultado indica uma maior incompressibilidade da nuvem condensada devido ao campo de vórtices. Tanto a análise da influência do termo de pressão quântica quanto o estudo dos modos coletivos nos ajudam a reproduzir de forma mais completa o problema da dinâmica de um Condensado de Bose-Einstein turbulento. Esperamos que uma análise qualitativa de nossos resultados contribua para responder algumas das questões que permanecem em aberto.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Fluido quântico atômico. Turbulência.

Agência de fomento: CAPES (88887.601151/2021-00)

Referências:

- 1 HENN, E. A. L. *et al.* Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301-1-045301-4, July 2009.
- 2 CARACANHAS, M. *et al.* Self-similar expansion of the density profile in a turbulent Bose-Einstein condensate. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 166, n. 1-2, p. 49-58, Jan. 2012.
- 3 CARACANHAS, M. *et al.* Self-similar expansion of a turbulent Bose-Einstein condensate: a generalized hydrodynamic model. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 170, n. 3-4, p. 133-142, Feb. 2013.

PG108

O papel de simetrias e grupos em modelos de machine learning quântico

HABERMANN, Gustavo; PINTO, Diogo Soares

gustavohabermann@usp.br

O desenvolvimento de computadores quânticos promete ser a solução para diversas aplicações, como simulação de sistemas quânticos ou resolução de problemas de álgebra linear de grande escala, cujo custo computacional excede a capacidade dos mais poderosos computadores clássicos. No entanto, computadores quânticos capazes de entregar todo o potencial da computação quântica ainda não são uma realidade. O estado da arte são os chamados *Noisy intermediate-scale (NISQ) devices* (1), estes computadores ainda sofrem de limitações, especialmente em número de *qubits*, atualmente até da ordem de 100 *qubits*, e com a presença de ruído que limita a profundidade dos circuitos quânticos implementados. Apesar das limitações, estes dispositivos ainda podem fornecer vantagens computacionais significativas, é com esse objetivo que os chamados *Quantum Variational Algorithms* (VQA) vem sendo desenvolvidos. (1) Estes algoritmos propõem aliar a computação quântica a técnicas de otimização clássicas para obter vantagem computacional sobre algoritmos puramente clássicos, enquanto as ferramentas de otimização nos permitem manter profundidade dos circuitos quânticos baixa. Neste trabalho vamos investigar o papel das simetrias na classe de VQA conhecida como *Quantum Machine Learning* (QML) e, em especial, como modelos de aprendizado invariantes sobre a ação de um grupo que codifica essas simetrias possibilita acelerar a resolução da tarefa computacional. (2)

Palavras-chave: Computação quântica. Informação quântica.

Agência de fomento: CAPES (88887.702987/2022-00)

Referências:

- 1 CEREZO, M. *et al* Variational quantum algorithms. **Nature Reviews Physics**, v. 3, n. 9, p. 625-644, 2021.
- 2 CEREZO, M. *et al* **Group-invariant quantum machine learning**. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2205.02261>. Acesso em: 08 de setembro de 2022.

PG109

Analysis of narrow-line magneto-optical traps through stochastic simulation

SANTOS, Bruno Nicolau; HENN, Emanuel Alves de Lima

bruno.nicolau.santos@usp.br

The deep understanding of light-matter interaction brought a myriad of scientific possibilities, such as improvements in atom interferometry, accurate spectroscopic methods, and control of ultracold gases. The 1997 Nobel Prize in Physics was awarded jointly to Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji, and William D. Phillips for developing methods to cool and trap atoms with laser light, also known as laser cooling. (1) The workhorse of laser cooling is the magneto-optical trap (MOT), a technique to trap and cool a dilute atomic gas. Briefly, cold gas in a magnetic quadrupole field scatters photons from a laser beam arrangement through electronic transitions. The momentum exchange, which relies on the scattering events, yields a trapping and viscous force whose magnitude depends on the scattering rate. Such rate is related to the atomic linewidth Γ so that the lower Γ , the lower the minimum reachable temperature. A MOT operating with Γ close to the photonic recoil is known as a narrow-line magneto-optical trap (2) (nMOT). The current MOT theories based on Doppler cooling are limited to predicting quantities such as temperature and the size of the atomic cloud size. In many experiments, there is either the absence of theoretical predictions or the necessity of adjustable scaling factors. The analytical MOT models rely on a 1D-MOT and ignore considerable difficulties from the spatial arrangement. (3) The case of nMOTs is even more delicate since gravity can be comparable with optical forces and, therefore, must be included. Then, to analyze 3D-nMOTs considering as many parameters as possible, we develop a stochastic simulation of the atomic dynamics. Our model relies on sampling trajectories through a Markovian process to infer a probability distribution of the atom position and velocities. We could precisely predict temperature, the centre of mass, and cloud shape relations of dysprosium and strontium nMOTs.

Palavras-chave: Magneto-optical trap. Stochastic simulation. Laser cooling.**Agência de fomento:** CAPES (88887.495932/2020-00)**Referências:**

- 1 RAAB, E. L., *et al.* Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 23, p. 2631, 1987.
- 2 LOFTUS, T. H. *et al.* Narrow line cooling and momentum-space crystals. **Physical Review A** v. 70, n. 6, p. 063413, 2004.
- 3 PRUDNIKOV, O.; TAICHENACHEV, A, YUDIN, V, *et al.* Three-dimensional theory of the magneto-optical trap. **Journal of Experimental and Theoretical Physics**, v. 120, n. 4, p. 587–594, 2015.

PG110

Produção de manooligossacarídeos a partir de pré-tratamentos verdes em resíduos agroindustriais e aplicação enzimática

CAPETTI, Caio; POLIKARPOV, Igor; SOUSA, Andrei Nicoli Gebieluca Dabul Dias de; PELLEGRINI, Vanessa de Oliveira Arnoldi

caiocapetti@usp.br

O reaproveitamento de resíduos agroindustriais ricos em material lignocelulósico no sentido de obter produtos de valor agregado tem sido uma tendência da indústria agrícola por reduzir a quantidade de rejeitos e aumentar lucros. A fração hemicelulósica é amplamente explorada nesse contexto, em particular, o xilano, que é o principal constituinte da hemicelulose de resíduos abundantes oriundos de gramíneas, como bagaço de cana-de-açúcar e sabugo de milho. (1) No entanto, existem também materiais ricos em manano, como o grão de café, cuja utilização é, no momento, notavelmente menos estudada, ainda que este seja um produto consumido em abundância no mundo todo. (2) A estrutura do manano consiste de uma cadeia principal de resíduos de manopiranosose ligados por ligações β -1,4, e, no caso particular dessa biomassa, ocorrem ramificações de resíduos de alfa-galactose, ligados por ligação α -1,6. (2) A obtenção de produtos de valor agregado a partir de rejeitos agroindustriais passa, necessariamente, pela desestruturação do material lignocelulósico, o que envolve etapas de pré-tratamento para reduzir a recalcitrância do complexo celulose-hemicelulose-lignina, e de hidrólise enzimática a fim de reduzir a complexidade da hemicelulose. Manooligossacarídeos (MOS) são produtos diretos da hidrólise do manano, que possuem propriedades pré-bióticas, anticarcinogênicas e imunomoduladoras benéficas à saúde humana e animal (3), apresentando, por essa razão, potencial para aplicação nas indústrias alimentícia, farmacêutica e cosmética, por exemplo. Este projeto propõe-se a fazer determinação da composição química de borra de café oriunda de cápsulas para cafeteiras e de coador convencional, realizar a triagem de alvos enzimáticos para promover a despolimerização do galactomanano presente nesse material, caracterizar bioquimicamente tais alvos e avaliar suas eficiências na produção de MOS. Dos alvos clonados, expressos e purificados com sucesso em teste de pequena escala anteriormente realizado, quatro foram selecionados para serem bioquimicamente caracterizados, a saber, dois da família GH26 (TtGH26 e RcGH26) e dois da família GH113 (JdGH113 e CcGH113). A determinação dos parâmetros bioquímicos é fundamental para que etapas subsequentes de hidrólise enzimática em substratos naturais sejam realizadas de maneira eficiente. Os próximos passos envolvem a efetiva utilização e avaliação desses alvos na hidrólise de biomassa lignocelulósica, como a borra de café, para produção de manooligossacarídeos. Para isso, será importante também explorar esse material, empregando metodologias de pré-tratamentos químicos a fim de tornar o manano que o compõe disponível e acessível às enzimas.

Palavras-chave: Mananases. Borra de café. Manooligossacarídeos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 BRANDT, A. *et al.* Deconstruction of lignocellulosic biomass with ionic liquids. **Green Chemistry**, v.15, p. 550-848, 2013. DOI:10.1039/c2gc36364j.
- 2 SINGH, S.; SINGH, G.; ARYA, S.K. Mannans: an overview of properties and application in food products. **International Journal of Biological Macromolecules**, v.119, p. 79–95, 2018. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.07.130.
- 3 SINGH, S., GHOSH, A., GOYAL, A. Manno-oligosaccharides as prebiotic-valued products from Agro-waste. **Energy, Environment, and Sustainability**, p. 205–221, 2018. DOI: /10.1007/978-981-10-7434-9_12.

PG111

Critério para adiabaticidade via geometrias clássicas

MAGNO, Gabriel Fukamoto; FERREIRA, Carlos Henrique Grossi; SOARES-PINTO, Diogo

gabriel.magno@usp.br

Discute-se na literatura de Física a validade da aproximação adiabática em regime de ressonância no contexto de sistemas quânticos puros. (1) Utilizando da abordagem de geometrias clássicas, (2-3) uma abordagem linear para modelos geométricos que aparecem com frequência em Física (e.g Fubini-Study, hiperbólico, de Sitter, anti-de Sitter, conforme), queremos apresentar um quantificador para adiabaticidade construído a partir da isometria acompanhante, conceito naturalmente definido neste cenário que tem a si atrelado uma estrutura de fibrado principal. Em outras palavras, queremos apresentar um quantificador vindo da geometria ambiente do problema que deve carregar consigo a história da evolução, algo esperado de um objeto que sirva como bom critério. Este quantificador irá nos permitir avaliar a validade da aproximação durante todo o decorrer da evolução dentro ou fora do regime de ressonância. Para fins de exemplificação, vamos trazer uma aplicação no caso de um qbit com Hamiltoniano específico apresentando *gap* de energia variando no tempo.

Palavras-chave: Evolução adiabática. Geometrias clássicas. Isometria acompanhante.

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

Referências:

- 1 AMIN, M. H. S. Consistency of the adiabatic theorem. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 22, p. 220401-1-220401-4, June 2009.
- 2 ANAN'IN, S. **Reflections, bendings, and pentagons**. 2021. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1201.1582.pdf>. Acesso em: 07.12.22. DOI: 10.48550/arXiv.1201.1582.
- 3 ANAN'IN, S.; GROSSI, C. H. Coordinate-free classic geometries. **Moscow Mathematical Journal**, v. 11, n. 4, p. 633-655, 2011.

PG112

Engenharia de cristais aplicada ao setor de anti-hipertensivos farmacêuticos - Hidralazina a forma solida pura

FIRMINO, Pollyana Pereira; ELLENA, Javier; SANTIAGO, Pedro

pollyana.firmino@ifsc.usp.br

Os principais objetivos da indústria farmacêutica são o planejamento, síntese e caracterização de compostos químicos, que podem intervir nas populações por meio do controle e combate de doenças e seus sintomas a partir do uso de insumos farmacêuticos ativos (IFA). Este projeto foca no desenvolvimento de novas formas sólidas de medicamentos anti-hipertensivos, principalmente cocrystalais, visando a otimização de suas propriedades físico-químicas a partir de engenharia de cristais. Para obtenção das novas formas solidas inicialmentr são realizadas pesquisas bibliográficas, busca de estruturas cristalinas de fármacos no banco de dados Cambridge Structural Database (CSD), de modo a selecionar os fármacos e os coformadores de interesse, para em seguida utilizar técnicas de cocrystalização como *slurry*, mecanoquímica, entre outros, de modo a se obter os novos cocrystalais. Estão sendo realizados testes com IFA's que possuem problemas de solubilidade e/ou permeabilidade a fim de melhorar essas propriedades. (1) Partindo deste princípio, até o momento foram obtidas quatro novas formas solidas. Dentre elas foi possível a obtenção do fármaco Hidralazina (Hid) em sua forma livre, um anti-hipertensivo vasodilatador comercialmente disponível como cloridrato de hidralazina (Hid-HCl) e que possui apenas duas formas polimórficas do sal reportadas no CSD. (2) Considerando a importância deste fármaco como vasodilatador direto foi determinada a estrutura cristalina e as propriedades físico-químicas do Hid livre. (3) Para obter o IFA puro, o cloridrato foi extraído do Hid-HCl a partir de uma reação ácido-base, onde foram obtidos cristais amarelos de Hid. Este material foi analisado por difração de raios X por pó e por monocristal, análises térmicas e testes de solubilidade via espectroscopia de absorção molecular no ultravioleta-visível. A Hid livre cristaliza no sistema cristalino ortorrômbico, no grupo espacial $P212121$, tendo sua estrutura cristalina estabilizada por três ligações de hidrogênio, duas constituindo um heterossínton assimétrico ($\text{CH}\cdots\text{N}$, $\text{NH}\cdots\text{N}$), o que leva à formação de fita ao longo do eixo c e uma interação $\text{NH}\cdots\text{N}$ conectando as fitas ao longo do eixo a permitindo a organização da rede cristalina. A Hid possui ponto de fusão em 179°C , solubilidade relativa em água purificada de 2,04 mg/ml. As análises de espectroscopia vibracional mostram-se estar de acordo com os resultados obtidos com a análise de difração de raios X por monocristal. Estes resultados serão utilizados ainda no desenvolvimento de novas formas sólidas a partir do desenho racional da síntese supramolecular, que podem melhora as propriedades fisico quimicas e métodos de produção de novas formas sólidas simples e eficientes.

Palavras-chave: Difração de raio-X. Solubilidade relativa. Heterossínton assimétrico.**Agência de fomento:** CNPq (160856/2021-3)**Referências:**

1 WONG, S. N. *et al.* Cocrystal engineering of pharmaceutical solids: therapeutic potential and Challenges. **CrystEngComm**, v. 23, n. 40, p. 7005–7038, 2021. DOI: 10.1039/D1CE00825K.

- 2 OKABE, N.; FUKUDA, H.; NAKAMURA, T. Structure of hydralazine hydrochloride. **Acta Crystallographica C**, v. 49 n. 10, p. 1844–1845, 1993. DOI: 10.1107/S0108270193003762.
- 3 VANITHA, K.; VARMA, M.; RAMESH, A. Floating tablets of hydralazine hydrochloride: optimization and evaluation. **Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 49, n.4, p. 811–819, 2013. DOI: 10.1590/S1984-82502013000400021

PG113

Plasmonic substrates composed of gold nano-islands for detection of SARS-CoV-2 virus.

OITICICA, Pedro Ramon Almeida; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de

praoitica@ifsc.usp.br

The need for rapid diagnosis and low-cost biosensors has been highlighted by the COVID-19 pandemic caused by the SARS-CoV-2 virus. Plasmonic sensors are important candidates, but this requires special approaches such as those employing random sized gold nano-islands on solid substrates. (1-2) In this work we fabricated plasmonic substrates consisting of gold nano-islands embedded onto solid glass, which were optimized by correlating their localized surface plasmon resonance (LSPR) response with their morphological properties. In a proof-of-principle strategy, genosensors were fabricated to detect SARS-CoV-2 ssDNA sequences using the LSPR spectra. (3) The plasmonic substrates fabricated here can be obtained at low cost and high fabrication throughput.

Palavras-chave: Biosensor. Gold nano-islands. Plasmonic substrate.

Agência de fomento: CAPES (88887.338538/2019-00)

Referências:

- 1 BADILESCU, S. *et al.* Gold nano-Island platforms for localized surface plasmon resonance sensing: a short review. **Molecules**, v. 25, n. 20, p. 4661, Oct. 2020.
- 2 QIU, G. *et al.* Dual-functional plasmonic photothermal biosensors for highly accurate severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 detection. **ACS Nano**, v. 14, n. 5, p. 5268–5277, May 2020.
- 3 SOARES, J. C. *et al.* Detection of a SARS-CoV-2 sequence with genosensors using data analysis based on information visualization and machine learning techniques. **Materials Chemistry Frontiers**, v. 5, n. 15, p. 5658–5670, 2021.

PG114

Non-thermal gamma-ray emission in the Galactic Center region

SOUSA, Davi Bessa de; VIANA, Aion da Escóssia Melo

davibessa@usp.br

The region surrounding the center of our Galaxy is one of the most complex and richest regions studied in high-energy astrophysics harboring a variety of potential sources of high-energy radiation. (1) Among these sources, there is the closest supermassive black hole to Earth, a cosmic Pevatron, dense molecular clouds, strong star-forming activity, multiple supernova remnants, and pulsar wind nebulae, arc-like radio structures, as well as the base of what may be large-scale galactic outflows. This project aims to reconstruct the radiative models that can explain the gamma-ray emission from the Galactic Ridge as seen by gamma-ray telescopes. Our goal is to simulate the gamma-ray flux on earth for different sources (2) and different models for the Central Molecular Zone's geometry.

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

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

Referências:

- 1 LONGAIR, M. S. **High energy astrophysics**. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- 2 AHARONIAN, F. A.; ATOYAN, A. M. On the emissivity of π^0 -decay gamma radiation in the vicinity of accelerators of galactic cosmic rays. **Astronomy and Astrophysics**, v. 309, p. 917-928, 1996.

PG115

Efeitos da melanina e da hemoglobina na cor da pele humana: um estudo teórico-computacional

LIMA, Victor Porto Gontijo; MORIYAMA, Lilian Tan

victorportog@hotmail.com

Nas últimas décadas, simulações de Monte Carlo têm se consolidado como ferramentas confiáveis para o estudo da propagação da luz em tecidos biológicos. Simuladores baseados em GPUs, como o CUDAMCML (1), são as melhores opções para executar essas simulações no menor tempo possível. A partir de uma modelagem teórico-computacional das propriedades ópticas de diferentes camadas da pele e de simulações com o CUDAMCML, o presente trabalho tem como objetivo encontrar pistas sobre a personalização da dose de luz para fototerapias, uma vez que a pele é a primeira barreira para procedimentos não-invasivos. Até o momento, nenhum ajuste de dose de luz está disponível em protocolos clínicos de Fototerapias ou de Terapia Fotodinâmica (2), apesar de diferenças interpessoais e anatômicas intrapessoais da pele dos pacientes. Neste trabalho, avaliam-se os efeitos de diferentes frações volumétricas tanto de melanina quanto de hemoglobina na cor da pele. Os dados de reflectância difusa superficial no espectro visível resultantes das simulações foram transformados para o espaço de cores CIELAB e comparados com dados experimentais disponíveis na literatura (3), de modo que apresentaram boa concordância.

Palavras-chave: Propagação da luz em tecidos. Simulações de Monte Carlo. Colorimetria.

Agência de fomento: CAPES (88887.631088/2021-00)

Referências:

- 1 ALERSTAM, E. *et al.* CUDAMCML: user manual and implementation notes. 2009. Disponível em: <https://www.lth.se/fileadmin/atomfysik/Biophotonics/Software/CUDAMCML.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2022.
- 2 SALVIO, A. G. *et al.* A new photodynamic therapy protocol for nodular basal cell carcinoma treatment: Effectiveness and long-term follow-up. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 37, p. 102668, 2022.
- 3 ALALUF, S. *et al.* The impact of epidermal melanin on objective measurements of human skin colour. **Pigment Cell Research**, v. 15, n. 2, p. 119-126, 2002.

PG116

NMR diffusion in porous media approached by a fractional Langevin model: applications to petrophysics

PEREIRA-ALVES, Felipe; OLIVEIRA, Éverton Lucas de; BONAGAMBA, Tito José

felipepereira@usp.br

This work is concerned with some of the complex range of phenomena resulting from the combined effects of Nuclear Magnetic Resonance (NMR) diffusion and restricted geometries in porous media. Although diverse, they are all connected by the common importance of the microstructure in determining the physical, chemical, and biological properties of the medium. The motion of spin-bearing molecules in a porous media is restricted even for short diffusion times. In the 1990s, a series of papers (1) was devoted to accounting for the contribution of nuclei whose motion were restricted by boundaries of the confining medium. One of the main results established (at the short-time limit) is a relation between the NMR signal with the surface-area-to-pore-volume ratio, an intrinsic characteristic of a porous medium which plays an important role in the oil industry. (2) Even though the basic theory of diffusion dynamics can be formulated and evaluated, proper interpretation of experimental results from real materials remains challenging and requires the development of theoretical models that connect the NMR signal to relevant features of porous media microstructure. Pereira-Alves, Soares-Pinto and Paiva (3) describe the NMR signal for anomalous diffusion governed by the generalized Langevin equation for all times, where a memory kernel that decays as a power law was chosen based on systems that unveil subdiffusion, notably in porous media, and a non-trivial dependence of the signal on the fractional exponent emerges. The knowledge of the NMR signal for both short and long-time limits, as well as intermediate times, offers interesting possibilities with regard to the extraction of parameters in the area of porous media. Therefore, the results presented in this work aims for arriving at a better understanding of how the properties of the rock surrounding the oil well are reflected in the NMR measurements that one can perform in practice, to better guide its application and be aware of its limitation.

Palavras-chave: Nuclear magnetic resonance. Diffusion. Porous media.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 GREBENKOV, D. S. NMR survey of reflected Brownian motion. **Reviews of Modern Physics**, v. 79, n. 3, p. 1077-1137, 2007.
- 2 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. J.; LATORRACA, G. A. (ed.). **Nuclear magnetic resonance : petrophysical and logging applications**. Amsterdam: Elsevier, 2002. 293 p. (Handbook of geophysical exploration: seismic exploration, 32).
- 3 PEREIRA-ALVES, F.; SOARES-PINTO, D. O.; PAIVA, F. F. **NMR diffusion in restricted environment approached by a fractional Langevin model**. 2022. Disponível em: [NMR_diffusion_in_restricted_environment_approached.pdf](#). Acesso em: 06.12.22. DOI:

10.48550/arXiv.2207.08366.

PG117

Computação de reservatório: polímeros conjugados como viabilizador de um reservatório físico

SOUZA, Rafael Francisco Santiago de; TORRES, Bruno Bassi Millan; FARIA, Gregório Couto

rafael.francisco.sousa@usp.br

A computação de reservatório surgiu no início dos anos 2000 e utiliza a dinâmica não linear de sistemas físicos, denominados reservatórios, similar a uma rede neural, capaz de ser treinada e executar tarefas, como exemplo, a classificação de sinais. No entanto, ao contrário de uma rede neural clássica, em que cada nó ("neurônio") da rede precisa ser treinado para executar uma determinada tarefa, os elementos de um reservatório físico funcionam de forma não treinada. A dinâmica não linear do reservatório se encarrega de propagar a informação pela rede do reservatório, sendo necessário apenas o treinamento de uma pequena rede neural de saída para executar a tarefa desejada (regressão/classificação). Esta principal diferença diminui enormemente o tempo de treinamento da rede neural. (1) Há diversos algoritmos baseados em computação de reservatório sendo aplicados com sucesso. (2) No entanto, há poucas iniciativas de se construir um dispositivo ("hardware") que opere sob os princípios da computação de reservatório. Um desses pouco exemplos foi recentemente publicado na revista *Science Advances* (3), e reporta a tentativa dos autores de criar tal rede computacional a partir do crescimento eletroquímico de fibrilas de materiais condutivos. Neste trabalho, aplicaremos estratégias similares para construir um reservatório físico. Nossa estratégia parte da polimerização eletroquímica de monômeros de 3,4-etileno dioxitiofeno (EDOT), pirrol, anilina e o-anisidina sob substrato contendo eletrodos de ouro. As condições utilizadas na eletropolimerização foram: voltagem senoidal com amplitudes entre 2 e 10 V e frequências variando de 25 a 200 Hz. Estas condições fazem com que fibras dendríticas poliméricas cresçam entre os eletrodos, conectando-os e formando o reservatório físico. Inicialmente, apenas o monômero de EDOT apresentou formação de fibras dendríticas passíveis de contactar os substratos de ouro. Os passos seguintes envolvem a caracterização do reservatório, visando avaliar sua dinâmica não linear, utilizando três métricas bastante exploradas na literatura: 1) rank de kernel, que quantifica o número de diferentes estados que o reservatório possui; 2) rank de generalização, que quantifica se o reservatório gera estados semelhantes para sinais semelhantes e, 3) a capacidade de memória que quantifica a retenção temporal dos estados dentro do reservatório.

Palavras-chave: Computação. Reservatório. Polímero.

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

Referências:

- 1 NAKAJIMA, K. *et al.* Information processing via physical soft body. **Scientific Reports**, v. 5, p. 10487-1-10487-11, 2015. DOI: 10.1038/srep10487.
- 2 VLACHAS, P. R. *et al.* Backpropagation algorithms and reservoir computing in recurrent neural networks for the forecasting of complex spatiotemporal dynamics. **Neural Networks**, v.126, p. 191-217,

June 2020. DOI: 10.1016/j.neunet.2020.02.016.

3 CUCCHI, M. *et al.* Reservoir computing with biocompatible organic electrochemical networks for brain-inspired biosignal classification. **Science Advances**, v.7, n. 34, p. eabh0693-1-eabh0693-8, Aug. 2021. DOI: 10.1126/sciadv.abh0693.

PG118

Avaliação dos efeitos da aplicação de ultrassom de baixa intensidade pré-radioterapia para tratamento do câncer: modelo animal

CUMPALLI, Alejandra Ayulo; AYALA, Erika Toneth Ponce; BAGNATO, Vanderlei Salvador; PRATAVIEIRA, Sebastião

alejandraayulo@usp.br

A radioterapia (RT) é uma técnica que utiliza radiações ionizantes, como os raios x, para destruir as células cancerígenas numa região específica, mediante a liberação de radicais livres os quais reagem com o DNA das células tumorais, levando-as à morte. (1) Porém, devido à incidência deste tipo de radiações provoca-se a ionização de átomos alterando sua estrutura, o que pode produzir efeitos secundários tais como fadiga, reações cutâneas, perda de cabelo e alterações das taxas sanguíneas. (2) Tais efeitos estão relacionados com a dose de radiação e extensão da área irradiada. Por outro lado, o ultrassom (US), é uma onda mecânica que produz efeitos térmicos, mecânicos e químicos no tecido biológico, os quais dependem dos parâmetros do ultrassom tais como o modo do feixe, frequência, intensidade, e o tempo de exposição, além do estado fisiológico do tecido. (3) O US tem sido muito utilizado com o objetivo de aumentar o fluxo sanguíneo, estimular as células inflamatórias, favorecer a cicatrização, e ajudar na redução de dores. A aplicação do ultrassom de baixa intensidade prévia à radioterapia tem mostrado uma maior indução de danos nas células cancerígenas, pois ultrassom ajuda a superar os microambientes hipóxicos nos quais os tumores se desenvolvem e que causam resistência à radioterapia. É assim que os efeitos da RT são otimizados, resultando na liberação de radicais livres com menores doses de radiação ionizante. Por tanto, este estudo visa avaliar os efeitos do US de baixa intensidade com a RT no metabolismo dos camundongos induzidos com células tumorais. A fim de desenvolver um protocolo mais eficiente para a indução da morte celular usando ultrassom de baixa intensidade prévia à radioterapia. Além disso, os danos histológicos causados pelo tratamento conjugado sob diferentes doses de ultrassom serão caracterizados em modelos de câncer.

Palavras-chave: Ultrassom terapêutico. Radioterapia. Tecido biológico.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 EISENBREY, J. R. *et al.* Sensitization of hypoxic tumors to radiation therapy using ultrasound-sensitive oxygen microbubbles. **International Journal of Radiation Oncology Biology Physics**, v. 101, n. 1, p. 88-96, May 2018.
- 2 EL KAFFAS, A. *et al.* Tumour vascular shutdown and cell death following ultrasound-microbubble enhanced radiation therapy. **Theranostics**, v. 8, n. 2, p. 314-327, 2018.
- 3 AMANCIO, A. C. G. *et al.* **Efeitos do ultrassom terapêutico na integração de enxertos de pele**

total em coelhos. 53 p. 2003. Dissertação (Mestrado em Bioengenharia) - Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2003.

PG119

Microscopia holográfica sem lentes com algoritmos de reconstrução de fase baseados nos métodos multiespectral e multialturas

D'ALMEIDA, Camila de Paula; OLIVEIRA, Natália Portes de; FEITOSA, Patrick; KURAMOTO, Cesar; CARVALHO, Felipe; COSTA, Gustavo Fernandes da; PRATAVIEIRA, Sebastião

camila.paula.almeida@usp.br

Recentemente, têm surgido técnicas de aquisição de imagens que não mais dependem do uso de lentes. Essas novas técnicas possibilitam a montagem de equipamentos portáteis, de baixo custo, que permitem um maior campo de visão com resolução micrométrica. Os equipamentos que aplicam esses novos métodos de imagem têm sua construção estrutural (*hardware*) desenvolvida em conjunto com programas computacionais (*software*) que são nela empregados. (1) Dentre as técnicas que têm inovado a forma de obtenção de imagens, está a microscopia holográfica sem lentes. (2) Esta microscopia faz uso de fontes de luz parcialmente coerentes para iluminar a amostra, que é posicionada logo acima de um sensor digital de imagem. A imagem gravada pelo sensor corresponde a um holograma, que é um padrão de interferência da luz que interage com os objetos da amostra com a luz que passou pela amostra sem sofrer interferência. Na etapa seguinte, de pós-processamento destas imagens, uma sequência de hologramas é usada como entrada para programas que recuperam as informações de amplitude e fase desses padrões espaciais, oferecendo como resultado uma imagem com mais nitidez dos elementos da amostra observada. Ao longo deste trabalho, desenvolvemos duas versões de microscópios holográficos sem lentes: multialturas e multiespectral. Ambos equipamentos possuem amplo campo de visão (de aproximadamente 30 mm²) e resolução espacial abaixo de 5 μ m. Eles se diferenciam pela forma de obtenção das imagens que serão digitalmente processadas: o primeiro obtém imagens com diferentes distâncias entre a amostra e o sensor, enquanto o segundo faz captura imagens usando fontes de luz espectralmente diferentes. Algumas otimizações foram feitas na versão multiespectral de nossos microscópios sem lentes, de modo a poder controlar computacionalmente todos os dispositivos envolvidos na aquisição das imagens (LEDs e sensor digital de imagem). Estas implementações permitiram a automatização do uso deste equipamento para monitoramento de amostras por tempo prolongado, além de oferecer condições seguras de temperatura para exposição de amostras biológicas sem a necessidade de desconectar fisicamente o equipamento do computador usado. As melhorias citadas permitiram o uso do equipamento no interior de uma estufa para acompanhar a evolução de culturas celulares em monocamada. Além disso, o equipamento tem sido testado para contagem de leveduras e também para detecção de outros microrganismos.

Palavras-chave: Microscopia. Imagens sem lentes. Recuperação de fase.

Agência de fomento: CAPES (88882.328745/2019-01)

Referências:

1 BOOMINATHAN, V. *et al.* Recent advances in lensless imaging. **Optica**, v. 9, n. 1, p. 1-16, 2022.

2 WU, Y.; OZCAN, A. Lensless digital holographic microscopy and its applications in biomedicine and environmental monitoring. **Methods**, v. 136, p. 4-16, Mar. 2018. DOI: 10.1016/j.ymeth.2017.08.013.

PG120

Estudo de microfabricação com pulso de femtossegundo em SiC

BUOZZI, Mario Trama; HUAMAN, José Luis Clabel; MENDONÇA, Cleber Renato

mariobuozzi2332@usp.br

A área de fotônica vem se destacando graças ao seu potencial tecnológico e científico. Mais especificamente, fenômenos ópticos não-lineares são alcançados utilizando lasers de femtossegundo, que podem ser explorados para a fabricação de microestruturas (1), como guias de onda, devido a alteração permanente do índice de refração do material no volume focal, e podem ser utilizados na composição de dispositivos fotônicos. Neste trabalho, investigamos filmes de carbeto de silício, SiC, determinando sua fluência de limiar de ablação, ou seja, a menor energia por unidade de área capaz de remover material da superfície. Esse material apresenta resistência a ambientes adversos, como altas temperaturas e pressão, além de ser quimicamente inerte. (2) Portanto, podemos aplicar guias de onda e sensores em microssistemas optoeletrônicos. Assim, foram preparadas quatro amostras via deposição química de vapor por feixe de elétron (EB-CVD), com tempos de 15 e 30 minutos, com e sem tratamento térmico, a fim de verificar uma possível influência desses parâmetros no processo de estruturação à laser. O setup experimental usado para a microfabricação das amostras é composto por um laser de Ti:Safira centrado em 800 nm, operando com taxa de repetição de 5 MHz e duração do pulso de 80 fs. O intervalo de energia utilizado foi de 2 a 5 nJ por pulso. Os experimentos foram realizados com objetivas de 0.4 e 0.65 NA e velocidades de varredura de 50 e 100 $\mu\text{m/s}$. Os resultados preliminares apontam que existe variação entre as amostras estudadas, sendo que os tempos de deposição fazem aumentar a fluência de limiar. Foram encontrados os valores médios de 50 mJ/cm^2 e 150 mJ/cm^2 para as amostras de 15 e 30 minutos sem tratamento térmico e de 30 mJ/cm^2 e 35 mJ/cm^2 para as amostras de 15 e 30 minutos com tratamento térmico. Tais resultados orientam futuros estudos de microfabricação neste material, levando ao desenvolvimento de dispositivos fotônicos e sensores, por exemplo.

Palavras-chave: Femtossegundos. Microfabricação. Carbeto de silício.

Agência de fomento: CAPES (88887684577/2022-00)

Referências:

- 1 GATTASS, R. R.; MAZUR, E. Femtosecond laser micromachining in transparent materials. **Nature Photonics**, v. 2, n. 4, p. 219-225, Apr. 2008.
- 2 MEHREGANY, M. *et al.* Silicon carbide MEMS for harsh environments. **Proceedings of the IEEE**, v. 86, n. 8, p. 1594-1609, Aug. 1998.

PG121

Elucidação do alinhamento interfacial de bandas e aplicação fotoeletroquímica da heterojunção CuWO₄/BiVO₄

RABELO, Lucas Gabriel; ROSA, Washington Santa; GONÇALVES, Renato Vitalino

lucasrabelo@ifsc.usp.br

A divisão fotoeletroquímica da água, mediada por materiais semicondutores, tem sido considerada uma técnica promissora para converter a energia solar em hidrogênio verde, uma fonte de energia limpa e sustentável. (1) No sistema fotoeletroquímico mais simples, um semicondutor do tipo *n* absorve radiação visível, originando pares elétrons-buraco; os elétrons fotoexcitados na banda de condução são direcionados para o contraeletrodo, onde ocorre a redução da água, enquanto que os buracos fotoexcitados na banda de valência fluem até a superfície do semicondutor e oxidam as moléculas de água. Todavia, uma série de limitações intrínsecas dos semicondutores, incluindo baixa mobilidade de cargas, ineficiente absorção da luz visível e instabilidade química, reduzem significativamente a eficiência teórica de produção de hidrogênio. Visando suprimir essas limitações, diversos trabalhos recentes têm se atentado ao desenvolvimento de heterojunções *n-n* para aplicação em sistemas fotoeletroquímicos, uma vez que essas combinações tipicamente apresentam excelente desempenho na divisão da molécula de água em oxigênio (sendo essa, a etapa mais desafiadora da reação global de catálise da água). Nesse contexto, sabe-se que a formação de heterojunções entre dois semicondutores é caracterizada pela presença de uma camada espacial de cargas, induzindo o fenômeno de dobramento de bandas e um campo elétrico interfacial. (2) Todavia, a maioria das publicações existentes investigam as heterojunções *n-n* empregando diagramas de bandas planas, ignorando os efeitos interfaciais que ocorrem nesses sistemas. Além disso, é comum atribuir a performance superior da heterojunção *n-n* como resultado de um campo elétrico interfacial que auxilia na separação e transporte das cargas fotogeradas. Nesse contexto, nós desenvolvemos a heterojunção *n-n* CuWO₄/BiVO₄ com os seguintes objetivos: (i) obter um fotoanodo eficiente para a evolução de oxigênio e (ii) elucidar o alinhamento interfacial de bandas, contemplando os efeitos interfaciais supracitados. A nossa heterojunção CuWO₄/BiVO₄, sintetizada através de uma delicada deposição por pulverização catódica, apresentou excelente desempenho fotoeletroquímico, alcançando uma taxa de aumento recorde ($\sim 500\%$) da densidade de fotocorrente do CuWO₄ puro. (3) As técnicas de UV-Vis, Mott-Schottky e XPS foram utilizadas para construir os diagramas de bandas planos dos semicondutores CuWO₄ e BiVO₄. Com essas informações, utilizou-se modelo clássico de Anderson para investigar o alinhamento interfacial de bandas na heterojunção CuWO₄/BiVO₄; embora muito simplificado, o modelo captura eficientemente o dobramento de bandas e formação do campo elétrico interfacial. Em contraste com trabalhos anteriores, nossos resultados apontam que a heterojunção CuWO₄/BiVO₄ apresenta grandes barreiras de potencial para o fluxo de elétrons fotogerados na camada de BiVO₄ para o CuWO₄; além disso, o campo elétrico interfacial possui uma direção contrária aquela desejada, acelerando elétrons para a interface semicondutor/eletrólito e buracos para o contraeletrodo. Assim sendo, no presente trabalho foi elucidado que a performance aprimorada da heterojunção *n-n* CuWO₄/BiVO₄ é devido a aplicação de potencial externo, uma vez que promove o fenômeno de *band flattening*, caracterizado pela redução das barreiras de potencial, permitindo, portanto, o fluxo ideal de cargas para as reações de divisão da água em hidrogênio e oxigênio.

Palavras-chave: Fotossíntese artificial. Heterojunção. Pulverização catódica.

Agência de fomento: CAPES (88887.601485/2021-00)

Referências:

- 1 LI, Z. *et al.* Photoelectrochemical cells for solar hydrogen production: current state of promising photoelectrodes, methods to improve their properties, and outlook. **Energy & Environmental Science**, v. 6, n. 2, p. 347-370, Feb. 2013.
- 2 IQBAL, A. *et al.* Charge transport phenomena in heterojunction photocatalysts: the WO₃/TiO₂ system as an archetypical model. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 13, n. 8, p. 9781-9793, Mar. 2021.
- 3 ROSA, W. S. *et al.* Ternary oxide CuWO₄/BiVO₄/FeCoO_x films for photoelectrochemical water oxidation: insights into the electronic structure and interfacial band alignment. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 14, n. 20, p. 22858-22869, May 2022.

PG122

Algoritmos quânticos variacionais

FERREIRA, Pedro Coutinho Azado; SOARES-PINTO, Diogo de Oliveira

pedroazado@ifsc.usp.br

Em 2016, o acesso ao primeiro computador quântico baseado em nuvem tornou-se disponível, mas as limitações de ruído e qubit impediram implementações dos algoritmos quânticos mais complexos. No entanto, cresceu o entusiasmo sobre o que poderia ser feito com esses novos dispositivos, que foram chamados de computadores NISQ (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*). (1) O tamanho atual do dispositivo de última geração varia de 50 a 100 qubits, mas a promessa de que computadores quânticos seriam capazes de acelerar algoritmos clássicos, chamada de vantagem quântica, ainda não foi alcançada para toda a gama de aplicações ditas possíveis. Além disso, a disponibilidade de computadores quânticos tolerantes a falhas parece ainda demorar muitos anos, ou mesmo décadas. A principal questão tecnológica é, portanto, como fazer melhor uso dos dispositivos NISQ para obter essa vantagem quântica. Qualquer estratégia desse tipo deve levar em conta o número limitado de qubits, suas conectividades limitadas e erros coerentes e incoerentes que limitam a profundidade do circuito quântico. Os Algoritmos Quânticos Variacionais (VQAs) surgiram como a principal estratégia para obter vantagem quântica em dispositivos NISQ. Dadas todas as restrições impostas pelos computadores NISQ, a estratégia utilizada para contorná-las foi utilizar a caixa de ferramentas da otimização clássica e conceitos de aprendizagem de máquina. De forma que os VQAs utilizam circuitos quânticos parametrizados para serem executados no computador quântico e, em seguida, terceirizam a otimização dos parâmetros para um otimizador clássico. Essa abordagem tem a vantagem adicional de manter a profundidade do circuito quântico rasa e, com isso, mitigar o ruído, em contraste com os algoritmos quânticos desenvolvidos para a era tolerante a falhas. O VQA é, portanto, um algoritmo híbrido clássico-quântico, onde utilizamos um processador quântico para preparar um estado de n qubits, que serão medidos e o resultado dessa medição é processado em um otimizador clássico, que retorna ao processador quântico a informação de como alterar, de pouco a pouco, o estado a ser preparado. Esse ciclo se repete até que o estado preparado convirja para um estado em que a solução do problema pode ser aproximada. Como exemplos de algoritmos que seguem esse roteiro, podemos citar o QAOA (*Quantum Approximate Optimization Algorithm*) e o VQE (*Variational Quantum Eigensolver*). Ainda não sabemos se esses algoritmos variacionais serão capazes de ultrapassar ou competir com os métodos e computadores clássicos que já desenvolvemos há décadas, mas é o caminho que podemos seguir para buscar desenvolvimentos tecnológicos na era NISQ. O objetivo deste trabalho, portanto, é encontrarmos maneiras de otimizar o preparo do estado inicial, a fim de evitar problemas com o processo de otimização.

Palavras-chave: Algoritmos quânticos variacionais. Computação quântica. Informação quântica.

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

Referências:

1 PRESKILL, J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. **Quantum**, v. 2, p. 79-179-20,

2018. DOI: 10.22331/q-2018-08-06-79.

PG123

Sistemas estáticos, estacionários e dependentes do tempo no Anti-de-Sitter e sua interpretação holográfica

RAMPONI, Tereza Cristina; HARTMANN, Betti

teka_ramponi@hotmail.com

As modificações da Relatividade Geral são geralmente motivadas assumindo que a Relatividade Geral é apenas um limite clássico de baixa energia de uma teoria quântica da gravidade. Um dos melhores candidatos para tal teoria continua sendo a teoria das Cordas. Uma previsão notável da Teoria das Cordas é a chamada dualidade calibre/gravidade, uma conjectura que relaciona as teorias da gravidade em $(d+1)$ dimensões espaço-temporais às teorias de calibre em d dimensões. O exemplo mais bem testado e bem estudado é a correspondência Anti-de Sitter/Teoria de Campo Conforme (AdS/CFT) (1), que conecta uma teoria da gravidade no espaço-tempo AdS em $(d+1)$ dimensões a uma teoria de calibre na fronteira de AdS. Essas ideias foram aplicadas principalmente à descrição de supercondutividade de alta temperatura na estrutura de supercondutores holográficos (2) também como a descrição do plasma quark-gluon. Em alguns desses modelos, foi demonstrado que os buracos negros formam cabelos escalares ou vetoriais espontaneamente. (3) O objetivo deste projeto é compreender o caso da vetorização espontânea em AdS.

Palavras-chave: Relatividade geral. Teoria de campo conforme. AdS/CFT.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 MALDACENA, J. The large N-limit of superconformal field theories and supergravity. **Advances in Theoretical and Mathematical Physics**, v. 2, n. 2, p. 231-252, 1998.
- 2 HARTNOLL, S. A.; HERZOG, C. P.; HOROWITZ, G. T. Holographic superconductors. **Journal of High Energy Physics**, v. 2008, n. 12, p. 015-1-015-41, Dec. 2008.
- 3 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B. Spontaneous scalarization of charged black holes at the approach to extremality. **Physics Letters B**, v. 792, p. 244-250, May 2019. DOI: 10.1016/j.physletb.2019.03.043.

PG124

Estudos estruturais e bioquímicos de 10 enzimas com possível atividade de PET hidrolase oriundas de metagenoma antártico

FURTADO, Adriano Alves; SANTILLAN, Jhon Antoni Vargas; PEREIRA, Humberto D' Muniz; CABREJOS, Diego Antonio Leonardo; RAMIREZ-SARMIENTO, Cesar A.; GARRATT, Richard Charles

adrianofurtado@ifsc.usp.br

Os plásticos têm sido até agora o produto com maior acumulação ao longo dos últimos anos e a sua fragmentação um dos maiores poluentes. O politereftalo de etileno polietileno (PET) é um dos materiais mais utilizados para a fabricação das garrafas descartáveis e tem sido o foco estratégico de decomposição e ponto estratégico da mitigação de poluição, no entanto os processos desenvolvidos até agora têm sido ineficientes. Com a descoberta de enzimas que degradam o PET (1) surge a oportunidade de aplicação biotecnológica visando a minimização desses problemas. Neste trabalho estudamos 10 enzimas recombinantes (e uma mutante) oriundas da antártica com potencial atividade catalítica frente a PET, identificadas por metagenômica. Os parâmetros de expressão das proteínas foram otimizados em diferentes linhagens de *Escherichia coli* e as purificações foram feitas entre duas e três etapas (Cromatografia de Afinidade, Troca iônica e Exclusão Molecular). Onde as proteínas purificadas foram cristalizadas a partir da técnica de gota sentada para obtenção de estrutura tridimensional via difração de raios-X. No presente momento temos cristais para 8 proteínas e a estrutura cristalográfica de uma, resolvida a 1.2 Å. Como perspectiva, assim como a difração dos cristais obtidos, desejamos realizar ensaios enzimáticos e uma avaliação entre as diferenças estruturais das potenciais PETases.

Palavras-chave: PET. Cristalografia. PETase.

Agência de fomento: CAPES (88887.635854/2021-00)

Referências:

1 YOSHIDA, S. *et al.* A bacterium that degrades and assimilates poly(ethylene terephthalate). **Science**, v. 351, n. 6278, p. 1196-1199, Mar. 2016.

PG125

Algoritmos quânticos variacionais e o aprendizado de máquina quântico geométrico

CORRER, Guilherme Ilário; SOARES-PINTO, Diogo de Oliveira

gicorrer@ifsc.usp.br

Desde sua proposição, a computação quântica tem despertado profundo interesse de pesquisadores e, mais recentemente, de gestores públicos e empresas. Como promessa para superar a computação clássica, aperfeiçoando os limites das possibilidades e tempos de execução computacionais, algoritmos quânticos foram formulados considerando computadores que atendem à hipótese de tolerância à falha quântica: com o esquema mais acertado de correção de erros, qualquer processo pode ser perfeitamente executado por um dispositivo quântico. No entanto, dada a grande quantidade de bits quânticos (qubits) necessários para protocolos de correção de erro (e.g. por concatenação, que escala exponencialmente) e as disponibilidades atuais dos computadores quânticos ruidosos de escala intermediária (NISQ - *Noisy Intermediate Scale Quantum*), esse horizonte se encontra distante. (1) Como forma de driblar essas dificuldades, técnicas alternativas têm sido propostas para que a tentativa de obter vantagem quântica seja mais palpável nos próximos anos. Uma dessas é a aplicação de computação híbrida, em que um circuito quântico sem correção de erro com portas descritas em termos de um conjunto de parâmetros prepara um estado que será utilizado para obter valores mensuráveis. Esses valores por sua vez são processados em termos dos parâmetros do circuito utilizando computação clássica, com o objetivo de extremizar uma função de custo, cumprindo uma tarefa dependente do problema de interesse. A essa estrutura é dado o nome Algoritmo Quântico Variacional (VQA). (2) Neste trabalho serão apresentados aspectos gerais dos VQA's, destacando sua estrutura, principais vantagens e dificuldades. Além disso, um exemplo de aplicação apresentado em (3) será ilustrado no contexto de aprendizagem de máquina quântico, cujo objetivo é construir uma função dos parâmetros do circuito que rotulam um estado de entrada baseado em alguma característica específica, como pureza ou emaranhamento. Através de métodos de Grupos e Álgebras de Lie, uma função que mantém o rótulo do estado invariante por transformações de um grupo é construída, de forma que o espaço de funções que cumpre a tarefa de rotular é reduzido para este subespaço. Como exemplo, este método é aplicado para a classificação da pureza de estados entre os rótulos puro ou misto, permitindo a proposição de operações unitárias de interesse.

Palavras-chave: Algoritmos quânticos. Grupos e álgebras de Lie. Aprendizagem de máquina quântico.

Agência de fomento: CAPES (88887.671544/2022-00)

Referências:

1 PRESKILL, J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*, v. 2, p. 79-179-20, 2018. DOI: 10.22331/q-2018-08-06-79.

2 CERZEZO, M. *et al.* Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, v. 3, n. 9, p.

625-644, Sept. 2021.

3 LAROCCA, M. *et al.* Group-invariant quantum machine learning. **PRX Quantum**, v.3, n.3, p.030341, Sept. 2022. DOI: 10.48550/arXiv.2205.02261.

PG126

Desenvolvimento e validação de biossensores portáteis de baixo custo de anticorpo para diagnóstico de doenças: dengue

CAMARGO, Maria Angélica de; GONÇALVES, Débora

maria_angelica@usp.br

Apesar dos avanços tecnológicos ao redor do mundo e nas mais diversas áreas, os países em desenvolvimento ainda enfrentam inúmeros desafios na área da Saúde. Além de lidar com as doenças mais comuns, tais como obesidade, diabetes e câncer, os países em desenvolvimento ainda enfrentam o aparecimento de doenças que são evitáveis ou passíveis de tratamento em países desenvolvidos. Nos países em desenvolvimento, os diagnósticos clínico e laboratorial geralmente são limitados e inacessíveis para a maioria dos pacientes, o que pode resultar em altas taxas de mortalidade por conta de doenças negligenciadas. (1) Uma alternativa promissora no cenário de diagnóstico é o uso de biossensores devido a características de simplicidade, precisão e alta sensibilidade. Apesar dos crescentes avanços na área acadêmica em relação aos biossensores, visando aumentar a sensibilidade da técnica e torná-la mais barata, ainda não existem no mercado testes comerciais utilizando essa metodologia. O objetivo geral deste trabalho é o desenvolvimento de biossensores de anticorpos para a detecção de marcadores do vírus da dengue baseados em eletrodos impressos descartáveis. Para isso, foram fabricados eletrodos de carbono utilizando a técnica de serigrafia (2) e estes foram modificados com filmes nanoestruturados contendo carbon black (CB). Como sonda redox foi utilizado ferroceno, o qual foi imobilizado na superfície do eletrodo utilizando três abordagens diferentes, i.e. dispersões com óxido de grafeno (GO), quitosana e dimetilformamida (DMF). (2) Os resultados da caracterização eletroquímica utilizando as técnicas de voltametria cíclica e voltametria de pulso diferencial mostraram um desempenho superior dos eletrodos modificados com filmes de quitosana e, consequentemente, essa arquitetura foi selecionada para os estudos subsequentes. Fez-se uma padronização da concentração de ferroceno utilizada para a modificação dos eletrodos, sendo testadas as concentrações de 2 a 5 mg/ml. Selecionou-se a concentração de 5 mg/ml como a melhor para a continuação dos testes. No momento estão sendo testadas duas técnicas de imobilização dos anticorpos: adsorção simples e ligação covalente. Paralelamente estão sendo feitos testes para a padronização do bloqueio dos eletrodos afim de aumentar a especificidade e melhorar a diferenciação dos resultados frente a amostras positivas e negativas. Estão sendo testadas soluções de BSA a 1%, 5% e 10%. Terminada a etapa de padronização dos eletrodos, estes serão caracterizados por técnicas de espectroscopia eletrônica e vibracional (UV-Vis, FT-IR, espalhamento Raman e geração por soma de frequências – SFG e PM-IRRAS), técnicas de microscopia e nanogravimetria. Em seguida será feita a detecção dos analitos de interesse (biomarcadores proteicos) por medidas de impedância elétrica, impedância eletroquímica, PM-IRRAS e detecção dos biomarcadores em amostras clínicas de soro. Por fim, será feita a otimização da técnica e dos reagentes utilizados na preparação da amostra e execução da técnica a fim de torná-la mais simples e rápida, compatível a um POC. Ao final do projeto espera-se a obtenção de um teste point-of-care específico, seletivo, sensível e de baixo custo. A tecnologia baseada em biossensores surge como uma alternativa promissora e elegante para sanar as deficiências e limitações das técnicas diagnósticas disponíveis hoje no mercado mundial. (3)

Palavras-chave: Sensor eletroquímico. Dengue.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 SHARMA, S. *et al.* Point-of-care diagnostics in low resource settings: present status and future role of microfluidics. **Biosensors**, v. 5, n. 3, p. 577-601, 2015.
- 2 IBÁÑEZ-REDÍN, G. *et al.* Screen-printed interdigitated electrodes modified with nanostructured carbon nano-onion films for detecting the cancer biomarker CA19-9. **Materials Science and Engineering C**, v. 99, p. 1502-1508, June 2019. DOI: 10.1016/j.msec.2019.02.065.
- 3 FARIA, A. M.; MAZON, T. Early diagnosis of Zika infection using a ZnO nanostructures-based rapid electrochemical biosensor. **Talanta**, v. 203, p. 153-160, Oct. 2019. DOI: 10.1016/j.talanta.2019.04.080.

PG127

Análises biofísicas e possíveis aplicações de partículas semelhantes a vírus de circovírus suíno tipo 3 (PCV3)

ROCHA, Tamiris de Souza; SALA, Fernanda Angélica; GARRATT, Richard Charles; THIEMANN, Otavio Henrique

tamiris.roc@gmail.com

O circovírus suíno é um vírus de DNA de fita simples conhecido por infectar suínos. Atualmente são conhecidas quatro espécies: PCV1, 2, 3 e 4. Dentre estes, o PCV3 está relacionado com graves impactos econômicos na suinocultura mundial, portanto, a elucidação da estrutura das proteínas envolvidas na composição destes vírus podem fornecer possíveis regiões relevantes para a produção de vacinas, ou anticorpos para detecção clínica de, um ou mais, membros desta família. Sendo assim, queremos expressar e purificar as partículas semelhantes a vírus (do inglês: *Virus Like Particles* ou VLPs) de circovírus suíno do tipo 3, e, então, realizar a análise por espalhamento dinâmico de luz (DLS), enquanto, *in silico*, a comparamos com as demais PCVs. Para isso, inserimos o gene da proteína Cap de PCV3 em vetor de expressão pET28a e transformamos a cepa *Escherichia coli* BL21(DE3) para produzi-la *in vitro* pela indução do *operon lac* pela adição de IPTG. Com a fração solúvel purificamos CapPCV3 etapas de ultracentrifugação por gradiente de sacarose. Avaliando o SDS Page escolhemos as amostras para DLS que indicou um raio hidrodinâmico de aproximadamente 10 nm, coerente com o esperado para VLPs de CapPCV3. *In silico*, comparamos as estruturas de PCV2, disponíveis em (1), com duas previsões via AlphaFold para PCV3: uma com, e uma sem, deleção N-terminal, o que indicou que esta deleção interfere na predição da estrutura terciária monomérica de CapPCV3, isto porque, *in vitro*, temos indícios da formação de VLP. Estes resultados mostram a necessidade de refinarmos a purificação dos VLPs, e de caracterizá-los via crio-microscopia eletrônica, semelhante a (2), a fim de conhecer as regiões que temos interesse para produção de antissoro, que é útil na produção de vacinas e anticorpos.

Palavras-chave: Circovírus. Gradiente de sacarose. Cryo-EM.

Agência de fomento: CAPES (88887.670916/2022-00)

Referências:

- 1 KHAYAT, R. *et al.* The 2.3-angstrom structure of porcine circovirus 2. **Journal of Virology**, v. 85, n. 15, p. 7856-7862, Aug. 2011.
- 2 BI, M. *et al.* Structural insight into the type-specific epitope of porcine circovirus type 3. **Bioscience Reports**, v. 40, n. 6, p. BSR20201109-1-BSR20201109-11, June 2020.

PG128

Estudo sobre os padrões espaço-temporais de autômatos celulares em redes complexas

JOAQUIM, Daniel Torkomian; BRUNO, Odemir Martinez

danieltorkjoaquim@ifsc.usp.br

Autômatos celulares e Redes Complexas são mecanismos e estratégias para o estudo dos chamados sistemas complexos, aqueles onde um grande número de agentes relativamente simples se organizam, sem a atuação de um comando central, em um todo coletivo que cria padrões, usa informações e em alguns casos pode até evoluir. (1) Enquanto o primeiro é definido como uma estrutura de grade, formada por componentes (células), que podem apresentar diferentes estados discretos, que variam ou não no tempo, esse dado por passos também discretos, de acordo com regras que dependem do próprio estado da célula em questão e dos estados das células dentro de uma vizinhança, o segundo pode ser definido como uma estrutura composta por um conjunto de nós (ou vértices) aos quais estão atrelados um conjunto de links (ou arestas). Seu grande potencial e abrangência não só os consolidaram como ferramentas desses sistemas como também revelaram sua importância, voltando a atenção para si mesmos de forma a tornarem-se objetos de investigação, por exemplo no caso das redes, da chamada ciência das redes. (2) Ainda, alguns autores têm proposto formas de atrelá-los e sua composição ganha notoriedade e enfoque. Caso dos Life-Like Network Automata (LLNA), método proposto para o reconhecimento de padrões em redes complexas, no qual a estrutura para evolução dos autômatos celulares ao invés de ser uma grade é uma rede complexa, cada célula é alocada em um nó da rede, e sua evolução, baseada nas regras do Jogo da Vida de Conway, produz padrões espaço-temporais que provêm as informações para a classificação das redes. (3) Esse trabalho visa investigar e aprofundar os conhecimentos a respeito desses padrões a partir das seguintes perguntas. Existe alguma ordenação das células, nós das redes, ideal ou facilitadora para identificação e distinção dos padrões de diferentes modelos de redes? A evolução desses autômatos e com isso os padrões são sensíveis aos estados iniciais impostos a cada célula? Como esses padrões respondem em casos de falhas e ataques às redes? Utilizando-se majoritariamente, até o momento, de uma base de redes sintéticas compostas de redes de Erdős-Rényi, mundo-pequeno e de Barabási-Albert, avaliou-se a ordenação por diferentes medidas estruturais e topológicas das redes, sendo a melhor por grau. Porém, uma vez que vários nós apresentam o mesmo grau, investigou-se o desempate desses nós de acordo com grau hierárquico, não resultando em diferenças significativas. Quanto aos estados iniciais, ou semente, os estudos desenvolvidos revelaram que os padrões podem ser sensíveis à posição de alocação do estado “um” em relação às características topológicas das redes, a depender do modelo dessas redes. Já nos estudos sobre falhas e ataques, os padrões mostraram-se mantenedores de sua estrutura geral, quando a semente é aleatória, para todos esses modelos de redes. Considera-se o aprofundamento desses estudos no que diz respeito à ordenação por características ou medidas que não estruturais ou topológicas, a avaliação da tarefa de classificação quando aplicadas as diferentes sementes, as quais determinados modelos mostraram-se sensíveis e a tarefa de classificação em redes com falhas ou ataques.

Palavras-chave: Redes complexas. Autômatos celulares. Redes autômatas.

Agência de fomento: CAPES (88887.684439/2022-00)

Referências:

- 1 MITCHELL, M. **Complexity** : a guided tour. New York : Oxford University Press, 2009. 368 p.
- 2 BARABÁSI, A.-L. **Network science**. 2015. Disponível em: <http://networksciencebook.com/>. Acesso em: 19 jan. 2021.
- 3 MIRANDA, G. H. B.; MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Exploring spatio-temporal dynamics of cellular automata for pattern recognition in networks. **Science Reports**, v. 6, p. 37329-1-37329-15, 2016. DOI: 10.1038/srep37329.

PG129

Descontaminação de rim ex-vivo para transplante com radiação ultravioleta-C e ultrassom

GOENAGA, Loraine; VOLLET FILHO, José Dirceu; INADA, Natalia; KURACHI, Cristina; BAGNATO, Vanderlei Salvador

lgoenagamafud@ifsc.usp.br

Este trabalho é a continuação de uma série de estudos na busca por demonstrar a viabilidade de uso de técnicas fotônicas, acopladas às máquinas de suporte aos órgãos, durante o transplante de rins, para evitar contaminação do doador para o receptor. Para isto usaremos descontaminação de líquidos circulantes e sua descontaminação bem como acoplamento de ultrassom no órgão para expelir micro-organismos. Atualmente, existe um aumento de infecções por bactérias multirresistentes e resistentes, causando anualmente mais de 24.000 mortes. (1) Além disso, existe uma grande quantidade de órgãos que são deixados transplantar em decorrência da infecção desses patógenos, prejudicando 49.355 pessoas que estão em lista de espera no Brasil para transplante de órgão. (2) O transplante renal é atualmente uma atividade que melhora a qualidade de vida em pacientes com insuficiência renal irreversível (doença renal crônica), que se tornou um problema de saúde pública global. Somado a isso, a Associação Brasileira de Transplante de Órgãos indicam que São Paulo é a cidade com mais pacientes em lista de espera para a doação de um rim, com um total de 14.330 pessoas, dados que agregam importância à pesquisa. (3) Por outro lado, o crescente problema da resistência que certos microrganismos adquiriram aos antibióticos, como as bactérias, têm a capacidade inata de encontrar novas maneiras de resistir aos tratamentos e podem transmitir material genético que permite que outras bactérias se tornem resistentes aos medicamentos. Os vírus que apresentam altas taxas de mutação que permitem uma evolução particularmente rápida, levaram à busca e necessidade de novas técnicas ou alternativas para o tratamento das mesmas. Essas alternativas correspondem a técnicas ópticas como terapia fotodinâmica (TFD) e radiação por luz ultravioleta (UV-C). Cada uma dessas técnicas tem a capacidade de inativar microrganismos com a presença de luz, sem a necessidade de usar antibióticos que se ajustam em uma mutação como no caso das bactérias, para sobreviver e multiplicar rapidamente. Nesse estudo, se utilizou a radiação UV-C com a combinação da técnica mecânica, o ultrassom, para descontaminar o líquido de perfusão circulantes de rim *ex-vivo* para transplante. A expectativa deste trabalho é eliminar ou reduzir a carga bacteriana do líquido refundido pelo órgão e dos resíduos bacterianos que permanecem no tecido do mesmo, garantindo descontaminação bem-sucedida.

Palavras-chave: Radiação ultravioleta-C. Descontaminação de rim. Inativação microbiana.

Agência de fomento: CNPq (140824/2021-9)

Referências:

1 CAMOU, T.; ZUNINO, P.; HORTAL, M. Alarma por la resistencia a antimicrobianos: situación actual y desafíos. *Revista Médica del Uruguay*, v. 33, n. 4, p. 277-284, 2017.

2 MALINZAK, L. A. P. *et al.* Infection related kidney discards. *In*: AMERICAN TRANSPLANT CONGRESS, 13., Seattle, 2013. **Abstracts** [...]. Hoboken: Wiley, 2013. abstr. C1248.

3 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE TRANSPLANTE DE ÓRGÃOS. Dados numéricos da doação de órgãos e transplantes realizados por estado e instituição no período: janeiro/março - 2022. **Registro Brasileiro de Transplantes**, ano XXVIII, n. 1. Disponível em: <https://site.abto.org.br/publicacao/xxviii-no1/>. Acesso em: 20 jul. 2022.

PG130

Simetrias escondidas das Teorias de Gauge

MALAVAZZI, Henrique; FERREIRA, Luiz Agostinho; LUCHINI, Gabriel

henrique.malavazzi@usp.br

Por muito tempo estiveram desconhecidas da literatura quais eram as reais quantidades conservadas dinamicamente e invariantes de gauge das teorias de gauge não-abelianas. No entanto, por meio das equações integrais destas teorias (1-2), foi observado que as cargas dinâmicas estão associadas aos autovalores de operadores calculados nos espaços dos loops e sua conservação deve-se pela condição de integrabilidade nestes espaços. A estrutura das teorias de gauge sobre os espaços dos loops mostrou-se extremamente rica, pois ao longo deste projeto de doutorado, fomos capazes de verificar a existência de simetrias que preservam a condição de curvatura nula no espaços dos loops. Tais simetrias são geradas por grupos cujos elementos constituem operadores de holonomia, sua ação ocorre sobre operadores não locais, tais como os operadores de Wilson e, de maneira geral, a ação transita entre as configurações físicas da teoria. Além disso, essa simetria tem grande similaridade com as *high form symmetries* (3) estudadas em uma grande variedade de modelos, especialmente nas teorias de gauge. Uma das motivações é buscar quantidades invariantes sobre o grupo de renormalização, e que portanto podem trazer informações sobre regime infravermelho. Deste modo, nosso objetivo consiste em construir o grupo gerador das simetrias escondidas das teorias clássicas de Yang-Mills e estudar suas consequências físicas, entendendo inicialmente, a construção em 2+1 dimensões e prosseguindo para 3+1, onde de fato encontramos as observáveis físicas.

Palavras-chave: Gauge. Simetrias escondidas. Curvatura.

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

Referências:

- 1 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. Integral form of Yang-Mills equations and its gauge invariant conserved charges. **Physical Review D**, v. 86, n. 8, p. 085039-1-085039-22, Oct. 2012.
- 2 FERREIRA, L. A.; LUCHINI, G. Gauge and integrable theories in loop spaces. **Nuclear Physics B**, v. 858, n. 2, p. 336-365, May 2012.
- 3 GAIOTTO, D. *et al.* Generalized global symmetries. **Journal of High Energy Physics**, v. 2015, p. 172-1-172-61, 2015. DOI: 10.1007/JHEP02(2015)172.

PG131

Sistema de lasers multimodo para bombeamento ótico de um feixe supersônico de Rb_2

TORRES, Manuel Lefran; FERNÁNDEZ, David Rodríguez; CARDOSO, Marcos Roberto; MARCASSA, Luis Gustavo

lefran@ifsc.usp.br

Neste trabalho mostramos a montagem e caracterização de um sistema de 7 lasers multimodo para realizar o bombeamento ro-vibracional de um feixe supersônico de Rb_2 . Estes lasers têm uma largura espectral de uns 15 cm^{-1} , por este motivo é preciso realizar uma modelagem espectral dos lasers para manter luz só nas transições que são importantes para o bombeamento ótico e eliminar frequências que estejam em transições que poderiam esquentar o feixe supersônico. Neste sentido projetamos e simulamos uma montagem experimental para a modelagem espectral que foi proposta por Metcalf *et al.* (1), a qual utiliza dos meios dispersivos orientados na direção ortogonal um com outro, o primeiro seria um VIPA (virtual imaged phase arrays) e o segundo é uma grade de difração de transmissão. As nossas simulações mostram que com um VIPA que tenha um free spectral range (FSR) de 15 GHz e uma grade de difração de transmissão de 1850 linhas/mm podemos alcançar uma resolução espectral de $\sim 2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ o qual seria ideal para fazer a modelagem que precisamos. Nestes momentos estamos aguardando a entrega do VIPA e da grade de difração, o qual deve acontecer até o final do mês de setembro.

Palavras-chave: Bombeamento ro-vibracional. Modelagem espectral.

Agência de fomento: FAPESP (2018/06835-0)

Referências:

1 METCALF, A. J. *et al.* Fully programmable two-dimensional pulse shaper for broadband line-by-line amplitude and phase control. **Optics Express**, v. 21, n. 23, p. 28029-28039, 2013.

PG132

Análise multiparamétrica do problema de fases em cristalografia de proteínas por aprendizado de máquina. Caso de estudo: lisozima da clara do ovo de galinha

JUCOVSKI, André; AMBROSIO, André Luis Berteli

andre.jucovski@usp.br

O problema de fases é notório na cristalografia de proteínas por difração de raios-X. A perda experimental de informações sobre as fases das ondas espalhadas construtivamente pelos componentes do cristal se devem às limitações tecnológicas intrínsecas aos sistemas de detecção dessa radiação. (1) Assim, é impossibilitado o cálculo direto da função de distribuição de densidade eletrônica na cela unitária através de uma transformada de Fourier. Atualmente, há dois métodos experimentais que podem ser aplicados para contornar esse problema (2): (i) a quantificação seletiva do componente dispersivo (λ -dependente) do fator de espalhamento atômico ou (ii) a substituição parcial do solvente aquoso ordenado por íons mais elétron-densos (metálicos ou halogênicos). Alternativamente, informações prévias, na forma de estruturas cristalinas conhecidas que são funcionalmente relacionadas ou homólogas a componentes no cristal, podem servir como fonte de um conjunto inicial de fases. Apesar de desafiadoras, quando viáveis, as aplicações desses diferentes métodos já possibilitaram a determinação de mais de uma centena de milhares de modelos atômicos, para as mais diversas proteínas (e seus complexos). Tendo em vista a existência de uma vasta coleção de informações estruturais já disponibilizadas no banco de dados Protein Data Bank, propõe-se aqui uma análise multiparamétrica do problema das fases, com base em aprendizagem de máquina profunda (AMP). (3) Nossa hipótese é a de que o extensivo mapeamento estatístico de observações sobre distribuições de fases conhecidas, como um modelo preditivo, pode permitir conclusões sobre o valor alvo de fases em conjuntos de dados ainda não resolvidos, eliminando assim a necessidade de experimentos adicionais ou de estruturas homólogas previamente conhecidas. Assim, neste Projeto de Mestrado, estão sendo testados modelos para um seletivo grupo de estruturas de lisozimas provenientes da clara do ovo de galinhas (da sigla HEWL, do inglês Hen egg-white lysozyme), no sentido de avaliar a aplicabilidade e sua reprodutibilidade para outras estruturas no futuro. Até este momento foi obtido êxito em realizar um ciclo completo, isto significa que foi possível a saída da predição das fases por AMP e a utilização destas para a reconstrução dos mapas de densidade eletrônica (MDE). Agora têm-se como objetivo o refino de métricas para melhorar o desempenho de predição (erro médio de $\sim 60^\circ$), além do desenvolvimento de uma avaliação quantitativa da fidelidade dos MDE.

Palavras-chave: Aprendizado de máquina. Cristalografia. Problema de fases.

Agência de fomento: CAPES (88887.675055/2022-00)

Referências:

1 DRENTH, J. **Principles of protein X-ray crystallography**. 3rd ed. New York: Springer, 2007. 332 p.

2 RUPP, B. **Biomolecular crystallography** : principles, practice, and application to structural biology. New York: Garland Science, 2010. 809 p.

3 GÉRON, A. **Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow** : concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2017. 547 p.

PG133

Fornecimento de gemcitabina e paclitaxel usando nanopartículas derivadas de membrana celular para quimioterapia e imunoterapia contra o câncer.

QUITIBA, João; ZUCOLOTTI, Valtencir

jquitiba@usp.br

O carcinoma pancreático humano está entre as neoplasias com maior número de mortes no mundo e a alta frequência de casos de recorrência e metástase exige o desenvolvimento de novas propostas terapêuticas para aumentar a atividade dos principais mecanismos efetores da imunidade celular. (1) Atualmente, a aplicação simultânea de diferentes quimioterapias melhora a eficiência do tratamento. Entretanto, a eficácia destes tratamentos ainda é limitada devido a vários problemas antigos, como a falta de especificidade do medicamento e sua baixa solubilidade. Nanopartículas biomiméticas para administração direcionada de fármacos têm sido usadas na terapia do câncer para melhorar a biocompatibilidade e diminuir a imunogenicidade com toxicidade mínima. (2-3) Desenvolvemos uma nanoestrutura para induzir simultaneamente o desenvolvimento de um perfil de ativação antitumoral em células imunocompetentes e também para aumentar a citotoxicidade tumoral das células do carcinoma pancreático. Foi desenvolvida uma nanopartícula com os principais componentes da membrana plasmática (MNPs) derivados das células do carcinoma pancreático (PANC-1) e conjugados com baixas doses de GEM e PTX. As partículas são estáveis em meio de cultura e capazes de entregar efetivamente os quimioterápicos. Nossos estudos revelaram que os MNPs são nanocarreadores eficientes de quimioterápicos às células cancerosas do pâncreas, produzindo uma citotoxicidade mais alta comparada à quimioterapia pura, sem citotoxicidade em células hepáticas saudáveis (HEPA-RG). Os ensaios de apoptose/necrose mostraram que a combinação de MNP-GEM com PTX favorece a atividade citotóxica em células neoplásicas pancreáticas e não em células hepáticas saudáveis. Nossos resultados contribuem para a compreensão da aplicação de MNPs como nanocarreadores de agentes antineoplásicos e seus efeitos no câncer pancreático, células saudáveis, bem como para investigar sua interação com células imunocompetentes.

Palavras-chave: Nanomedicina. Imunologia. Câncer.

Agência de fomento: FAPESP (2019/18933-0)

Referências:

- 1 KROLL, A. V.; FANG, R. H.; ZHANG, L. Biointerfacing and applications of cell membrane-coated nanoparticles. **Bioconjugate Chemistry**, v. 28, n. 1, p. 23-32, 2017.
- 2 FANG, R. H. *et al.* Cancer cell membrane-coated nanoparticles for anticancer vaccination and drug delivery. **Nano Letters**, v. 14, n. 4, p. 2181-2188, 2014.
- 3 CHEN, X. *et al.* Internalization pathways of nanoparticles and their interaction with a vesicle. **Soft Matter**, v. 9, n. 31, p. 7592-7600, 2013.

PG134

Efeitos de strain na fase zincblend em nanofios politípicos

SIQUEIRA, Anderson Henrique; SIPAHI, Guilherme Matos

anderson.siqueira@usp.br

Nanofios semicondutores são uma das tecnologias onde houve um progresso considerável num passado recente com uma gama ampla de aplicações que vão dos dispositivos eletrônicos aos biossensores. Os nanofios são nanoestruturas semicondutoras unidimensionais que apresentam propriedades intrínsecas a sua baixa dimensionalidade. Em condições de crescimento controladas é possível obter esses semicondutores onde as fases zincblend e wurtzita coexistem. Essa coexistência de duas fases cristalinas é denominada politipismo. O politipismo das fases zincblend e wurtzita em nanofios de compostos III-V, está relacionada a parâmetros como diâmetros do nanofio e a temperatura de crescimento dessa nanoestrutura. (1) A ocorrência do politipismo nessas nanoestruturas, acarreta em diferentes propriedades ópticas e eletrônicas para as fases zincblend e wurtzita. Considerando a direção de crescimento paralela à coordenada z , a direção de crescimento mais comum para a fase zincblend é a direção [111], enquanto que para a fase wurtzita, a direção de crescimento mais comum é a direção [0001]. A variação das fases cristalinas zincblend e wurtzita ao longo da direção de crescimento resulta em regiões de confinamento. O nanofio com politipismo wurtzita/zincblend pode ser considerado uma heteroestrutura, onde cada fase cristalina possui constantes de redes diferentes. Nesse caso, as constantes de rede tendem a se ajustar (2) dando origem a um *stress* na interface politípica wurtzita/zincblend, ou seja, o *stress* é aplicado na direção perpendicular a direção de crescimento. Como efeito do *stress* aplicado surge um *strain* biaxial na interface wurtzita/zincblend. Neste trabalho será desenvolvido um modelo matemático que descreve o *strain* ao longo da fase zincblend, e também será analisado os efeitos desse *strain* em um poço quântico wurtzita/zincblend/wurtzita em um nanofio politípico.

Palavras-chave: Nanofios. Politipismo. Strain.

Agência de fomento: CAPES (88887.371660/2019-00)

Referências:

- 1 DICK, K. A. *et al.* Control of iii-v nanowire crystal structure by growth parameter tuning. **Semiconductor Science and Technology**, v. 25, n. 2, p. 024009, 2010.
- 2 ERTEKIN, E. *et al.* Equilibrium limits of coherency in strained nanowire heterostructures. **Journal of Applied Physics**, v. 97, n. 11, p. 114325, 2005.

PG135

Desenvolvimento de imunossensor impedimétrico eletroquímico para diagnóstico da tuberculose

RIBEIRO, Luisa Vogado; ZUCOLOTTI, Valtencir; BERNARDI, Juliana Cancino

luisavogado@usp.br

Este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de um dispositivo impedimétrico eletroquímico para detecção de *Mycobacterium tuberculosis*, agente causador da maioria dos casos de tuberculose (TB). (1) Relatada há mais de um século, a tuberculose foi a principal causa de morte por um único agente infeccioso até a pandemia de coronavírus (COVID-19), superando HIV/AIDS. (1) Os métodos tradicionais para o diagnóstico de TB são a baciloscopia de escarro, cultura líquida e, recentemente, testes moleculares. (2) Esses testes apresentam muitas limitações, como a baixa sensibilidade e a não diferenciação entre bacilos vivos e mortos, não sendo úteis para indicar a gravidade da doença. (2) Neste contexto, os sensores eletroquímicos têm atraído atenção devido à sua simplicidade, instrumentação de baixo custo, limites de detecção muito baixos e resposta rápida. (3) Neste estudo é apresentado um imunossensor impedimétrico eletroquímico para a detecção da proteína recombinante CFP10:ESAT6 via bioreconhecimento de anticorpos Anti-ESAT-6 e anti-CFP10 para diagnóstico de *Mycobacterium tuberculosis*. O imunossensor é desenvolvido utilizando eletrodos de óxido de índio estanho (ITO), cuja superfície foi modificada com (3-aminopropil) trietoxissilano (APTES) para imobilizar covalentemente os anticorpos. Estes são então imobilizados na superfície do eletrodo via linker EDC/NHS (1-Etil-3-(3-dimetilaminopropil) carbodiimida/N-Hidroxissuccinimida). Em seguida, ocorre a etapa de bioreconhecimento da proteína recombinante pCFP10:ESAT6, com concentração inicial de 200 ng/mL. A caracterização do imunossensor foi realizada por meio de voltametria cíclica (CV) e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS), avaliando o bioreconhecimento impedimétrico do par proteína-anticorpo pelo uso do grupo redox K₄Fe(CN)₆. A utilização destas técnicas a cada etapa de construção do dispositivo permite o monitoramento e a medição direta da interação entre as biomoléculas, essenciais aos estudos de otimização do dispositivo que estão sendo realizados.

Palavras-chave: *Mycobacterium tuberculosis*. Imunossensor impedimétrico. Espectroscopia de impedância eletroquímica.

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

Referências:

- 1 ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAÚDE (OMS). **Global tuberculosis report 2021**. Geneva, 2021.
- 2 ACHARYA, B. *et al.* Advances in diagnosis of Tuberculosis: an update into molecular diagnosis of *Mycobacterium tuberculosis*. **Molecular Biology Reports**, v. 47, n. 5, p. 4065–4075, 2020.
- 3 CANCINO-BERNARDI, J. *et al.* Detection of Leukemic Cells by using Jacalin as the Biorecognition Layer: a new strategy for the detection of circulating tumor cells. **ChemElectroChem**, v. 2, n. 7, p. 963–969, July 2015.

PG136

Turbulent Bose-Einstein condensates as an out-of-equilibrium quantum systems

OROZCO, Arnol Daniel Garcia; BAGNATO, Vanderlei Salvador; MADEIRA, Lucas; FRITSCH, Amilson Rogelso; ARMIJOS, Michelle Alejandra Moreno

arnolgarcia@ifsc.usp.br

The study of quantum systems out of thermal equilibrium is a topic of great current interest and constitutes one of the frontiers of knowledge. A physical system considered extremely important in this context is the Bose-Einstein condensates produced with trapped atoms. In this work, we use a Bose-Einstein condensate of ^{87}Rb atoms to, through excitations, take it out of equilibrium. One of the critical out-of-equilibrium states is the quantum turbulence state. We created the turbulence state through mechanical excitations in the magnetic trap that confines the cloud. We started a characterization process through the time-of-flight measurement of the cloud momentum distribution as a function of the excitation amplitude. Quantities such as entropy (1) and energy flow (2), characterizing the cascade, are typical of the turbulence state. In the final part of this work, we investigate the so-called *Non-Thermal-Fixed Points* (NTFP), where the system remains out of equilibrium but evolves according to specific special laws of scales. Around these points, the system can be said to belong to a particular class of universality characterized by two exponents that make it possible to predict the temporal evolution of the momentum distribution. (3) Not only have we demonstrated that turbulence belongs to this class of phenomena, but we are profoundly investigating this fact.

Palavras-chave: Bose-Einstein condensate. Turbulence .Energy flow.

Agência de fomento: CNPq (142436/2018-6)

Referências:

- 1 MADEIRA, L. *et al.* Entropy of a turbulent Bose-Einstein condensate. **Entropy**, v. 22, n. 9, p. 956, 2020.
- 2 GARCÍA-OROZCO, A. D. *et al.* Intra-scales energy transfer during the evolution of turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate. **Europhysics Letters**, v. 130, n.4,p. 46001, 2020.
- 3 GARCÍA-OROZCO, A. D. *et al.* Universal dynamics of a turbulent superfluid Bose gas. **Physical Review A**, v. 106, n.2,p.023314, Aug. 2022.

PG137

Estudos estruturais da enzima RmlA de streptococcus pneumoniae

MORENO, Louis; NASCIMENTO, Alessandro

louis.oliveira@usp.br

Para o ano 2050, a OMS estima que a resistência bacteriana será a principal causa de morte no mundo. Nesse contexto, a pesquisa em novos potenciais antimicrobianos é uma estratégia permanente no intuito de inovar na inativação de vias metabólicas cruciais para os ciclos de vida destes patógenos. (1) Em diversas espécies de bactérias patogênicas tem sido demonstrado que a síntese de dTDP-L-ramnose é fundamental para viabilidade e virulência sendo, portanto, um alvo relevante na sugestão para uma nova classe de antibióticos. (2) O presente projeto tem como objetivo o estudo da enzima RmlA, a primeira enzima da via metabólica para a síntese da ramnose. O gene escolhido provém da cepa CGSSp19BS75 de *Streptococcus pneumoniae*, altamente presente nos hospitais da macrorregião nordeste do Estado de São Paulo. (3) Foi comprado o gene sintético para a expressão com os códons otimizados para *Escherichia coli* e a cepa empregada foi Artic Express. A purificação se dá em duas etapas, primeiramente por cromatografia de afinidade em resina de Niquel e por cromatografia de exclusão molecular. Foram feitos ensaios do tipo Differential Scanning Fluorimetry (DSF) para otimizar sua estabilidade em tampão, obtendo a maior estabilidade em pH 8,0 e com concentrações de NaCl em 500 mM. Também, essa técnica permite observar o aumento da sua estabilidade térmica de forma qualitativa na presença dos seus ligantes dTTP e Mg. Os ensaios de Dynamic Light Scattering (DLS) mostram que a enzima é monodispersa em solução e sugerem que seu estado oligomérico é de tetrâmero. Foram então conduzidos experimentos de cristalização bem-sucedidos na presença destes ligantes e o experimento de difração de raios x foi realizado no acelerador de partículas SIRIUS. Estes resultados ainda estão em análise, mas preliminarmente temos uma resolução de 2.57 Å, podendo chegar a 2.3 Å uma vez concluído o tratamento dos dados.

Palavras-chave: RmlA. Resistência microbiana. Cristalografia.

Agência de fomento: CAPES (88887.611116/2021-00)

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. New report calls for urgent action to avert antimicrobial resistance crisis Disponível em: <https://www.who.int/news/item/29-04-2019-new-report-calls-for-urgent-action-to-avert-antimicrobial-resistance-crisis>. Acesso em: 16.09.22.
- 2 ANDREWS, S. The rhamnose pathway Marie-France Giraud and James H Naismith †. **Current Opinion in Structural Biology**, v.10.n.6,p. 687–696, 2000.
- 3 MEDEIROS, M. I. C. *et al.* Antimicrobial susceptibility of streptococcus pneumoniae isolated from patients in the northeastern macroregion of São Paulo state, Brazil, 1998-2013. **Jornal Brasileiro de Patologia e Medicina Laboratorial**, v. 53, n. 3, p. 177–182, 2017.

PG138

Quantum gases research out of equilibrium-quench

SALCEDO, Edward Gutenberg Iraitá ; GUTIERREZ, Emmanuel David Mercado; CASTILHO, Patricia Christina Marques; CHACCA, Cosme Wilfredo Tancayllo; FARIAS, Kilvia Mayre; FERNANDES, Júlia de Camargo; GASPAR, Pedro Minarelli; BAGNATO, Vanderlei Salvador

edwardiraita@usp.br

Traditionally Bose-Einstein condensate is an equilibrium state with a distribution of population between the ground state and the excited states of an external potential for particles. However, in some situations, modifications can take the system out of the traditional equilibrium. Because the system can thermalize through interactions, returning to the equilibrium situations. The observation of such phenomena can be done through a quantum quench. In this process an initial Hamiltonian defined as $H(a)$ has the system in an equilibrium state. Suddenly the Hamiltonian is changed to $H(b)$, and the system finds itself out of the situation of equilibrium of the new Hamiltonian. A time evolution that must occur promotes the system to a new state and the reaching of these new states corresponds to a transient regime. (1) Experimentally, this occurs when we produce abrupt changes in the potential that trap the atoms. In our laboratory, this quantum quench is performed for sodium atoms, by changing the frequency from 90 rad/sec to 400 rad/sec, followed by the observation of the system during different time intervals. The main result is that our system suffers a quench, producing evolution of the condensate fraction and the temperature being these magnitudes analyzed through the density profile of the atoms (bimodal mode) and the gaussian profile. Finally, preliminary measurements indicate how fast the new equilibrium condition is reached and also the rate of these magnitudes allow us to identify adiabatic and non-adiabatic regimes.

Palavras-chave: Bose Einstein condensate. Quenching atoms. Optical potential.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 EIGEN, C. *et al.* Universal prethermal dynamics of Bose gases quenched to unitarity. **Nature**, v. 563, n. 7730, p. 221-224, Nov. 2018.

PG139

Performance the “Quench” process into the Hamiltonian of a confined Bose-Einstein condensate

CHACCA, Cosme Wilfredo Tancayllo; SALCEDO, Edward Gutenberg Iraitá; FARIAS, Kilvia Mayre; CASTILHO, Patricia Christina Marques; BAGNATO, Vanderlei Salvador; GUTIERREZ, Emmanuel David Mercado; GASPAR, Pedro Minarelli

tancayllochacca@usp.br

Since 1925 when Albert Einstein predicted the existence of a new state of matter obtained from bosonic atoms when they are cold close to absolute zero, the Bose-Einstein condensate has always been considered an already established equilibrium system. (1) However, to study aspects of non-equilibrium physics like thermalization and universal aspects of critical dynamics, we have to take an initial stationary state into a complicated excited state. One of the ways to do that is called “Quantum Quench” where sudden changes in the system lead to the formation of an out-of-equilibrium system. (2-3) In this experimental work, we have changed the trapping potential of an Optical Trap. For that we varied the light intensity using an acousto-optical modulator. The condensate cloud was obtained applying evaporative cooling. It was analyzed by an absorption image using a time of flight (**TOF**) measurement. After that, we followed the Quench process. So we have promoted the following experimental sequence: Production of sodium BEC (Na) in an initial state $H(\alpha)$. After that the system is excited in a time interval changing to the state $H(\beta)$. So the **TOF** measurements were implemented. The data obtained demonstrate the ability to analyze the deviation produced by the “Quench” from the initial amount of equilibrium.

Palavras-chave: Quench. Thermalization. Trapping.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 MARTINS, S. C. *et al.* Excitação de um condensado de Bose-Einstein: um experimento pedagógico para transferência entre estados quânticos. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 43, 2021. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2020-0507.

2 ERNE, S. *et al.* Universal dynamics in an isolated one-dimensional Bose gas far from equilibrium. **Nature**, v.563, p.225–229, 2018. DOI:10.1038/s41586-018-0667-0.

3 DAS, S. Quantum quench and universal scaling. **Oxford Research Encyclopedia of Physics**. Retrieved 8 Sept. 2022. Disponível em: <https://oxfordre.com/physics/view/10.1093/acrefore/9780190871994.001.0001/acrefore-9780190871994-e-55>. Acesso em:16.09.22.

PG140

Gigantes Microscópicos: o uso da Cryo-EM para elucidação de estruturas de hemocianinas

ELLENA, Matias; MUÑOZ, Sebastián Manuel Muñoz; FERNÁNDEZ, Víctor Castro; LEGUIA, Victoria Cristina Guixe; BECKER, María Inés; AMBROSIO, Andre Luis Berteli

matiasne@usp.br

A crio-microscopia eletrônica de partículas isoladas (cryo-EM) está possibilitando um notável progresso na biologia estrutural desde a chamada “revolução da resolução”, principalmente devido à sua capacidade de fornecer informações estruturais de alta resolução de complexos proteicos grandes e dinâmicos. Com essa ferramenta em mãos comprometemos-nos a determinar a estrutura da hemocianina de *Concholepas concholepas* (CCH), um organismo marinho prevalente nas costas do Pacífico sul. Hemocianinas são oligômeros de megadaltons que participam no transporte de oxigênio em múltiplos organismos invertebrados. (1) Hemocianinas são usadas como imunoestimulantes naturais não tóxicos e inespecíficos com aplicações biomédicas e clínicas fundamentais; portanto, entender os mecanismos moleculares precisos das hemocianinas é essencial para a melhoria futura dessas aplicações. (2) A elucidação da estrutura desta hemocianina demonstrou ser um desafio, devido a grande diversidade estrutural quando comparado a hemocianinas homólogas, mas também explica a razão da sua eficiência distinta em gerar resultados adjuvantes apropriados em terapias imunológicas orientadas. Caracterizações bioquímicas preliminares de CCH demonstraram a existência de duas cadeias polipeptídicas distintas, formando anéis heterodiméricos. (3) Cada subunidade de CCH aparenta possuir oito domínios globulares de ligações de oxigênio, denominados unidades funcionais (FU), que são glicosilados de forma diferenciada. Graças ao Titan Krios presente no LNNano em Campinas foi possível desenvolver mapas de densidade eletrônica em alta qualidade e, utilizando as FU obtidas pelos nossos colaboradores, a construção da estrutura da proteína também se possibilitou.

Palavras-chave: Cryo-EM. Hemocianina. CCH.

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

Referências:

- 1 IOANNES, P. *et al.* Hemocyanin of the molluscan *Concholepas concholepas* exhibits an unusual heterodecameric array of subunits. **Journal Biological Chemistry**, v. 279, n. 25, p. 26134-26142, 2004. DOI. 10.1074/jbc.M400903200
- 2 BECKER, M. I. *et al.* Immunodominant role of CCHA subunit of *Concholepas* hemocyanin is associated with unique biochemical properties. **International Immunopharmacology**, v. 9, n. 3, p. 330-339., 2009, DOI. 10.1016/j.intimp.2008.12.011
- 3 MARKL, J. Evolution of molluscan hemocyanin structures, **Biochimica et Biophysica Acta**, v. 1834, n. 9, p. 1840-1852, 2013, DOI. 10.1016/j.bbapap.2013.02.020.

PG141**Charged and radially excited boson stars**

CONSOLE, Felipe; HARTMANN, Betti; BRIHAYE, Yves

felipe.console@usp.br

We construct gauged boson stars in asymptotically flat and asymptotically Anti-de Sitter spacetimes with an exponential scalar field potential that appears in gauge-mediated supersymmetry breaking. We found new solutions with so-called “wavy scalar hair” (1), that is, solutions with spatial oscillations of the scalar field far outside the core of the stars. We also found excited states characterized by the number of nodes of the scalar field, which appear inside the core of the boson star. These solutions split into two disjoint families: (i) one connected to the vacuum solution and quantized in terms of the gauge invariant “frequency” for small amplitudes of the scalar field; (ii) another family which is not connected to the vacuum solution. The physical properties of these solutions are discussed and a phase diagram is presented for the asymptotically Anti-de Sitter spacetime, along with some remarks concerning its holographic interpretation.

Palavras-chave: Gravidade. Relatividade geral. Estrelas de bósons.**Agência de fomento:** CAPES (Não se aplica)**Referências:**

1 BRIHAYE, Y.; CONSOLE, F.; HARTMANN, B. Inflation inside non-topological defects and scalar black holes. *Symmetry*, v. 13, n.2, p. 1-13, Oct. 2021.

PG142

Caracterização bioquímica e estrutural de Shs1: uma septina única de *Saccharomyces cerevisiae*

SALADINO, Giovanna Christe dos Reis; CAVINI, Italo Augusto; ARAUJO, Ana Paula

giovanna.saladino@usp.br

Septinas são proteínas de uma família altamente conservada de GTPases, consideradas o quarto componente do citoesqueleto. As septinas de *S. cerevisiae* foram as primeiras descritas na literatura (1), mas informações sobre sua estrutura e bioquímica ainda estão incompletas. Este é o caso de Shs1, única septina de levedura não essencial para a divisão celular (2), mas que merece atenção, pois: Shs1 substitui a septina Cdc11 como subunidade terminal do octâmero de septinas, ligando-se a Cdc12, bloqueando a polimerização e, em seu lugar, promovendo a formação de anéis e redes. (3) Uma vez que o estudo de septinas integrais apresenta muitas dificuldades e Shs1-Cdc12 e Cdc11-Cdc12 interagem por seus domínios G, estes domínios foram escolhidos como objetos de estudo deste trabalho. Assim, nosso foco está na caracterização do domínio G de Shs1, visando compreender seu papel na formação de filamentos e sua interação com Cdc12, de forma comparativa a interação Cdc11-Cdc12. Para isso, as sequências de DNA codificantes dos domínios G foram clonadas por *Gibson Assembly* e expressas em *E. coli* BL21(DE3). Shs1 foi expressa isoladamente e também foi co-expressa com Cdc12, que por sua vez foi paralelamente co-expressa com Cdc11. As proteínas e complexos foram purificadas por cromatografia de afinidade e exclusão molecular e utilizadas em ensaios para determinação de estado oligomérico, teor de nucleotídeo, atividade de GTPásica, caracterização de estrutura secundária, estabilidade térmica e cristalização. Cdc12, que é cataliticamente ativa, foi co-purificada ligada a GDP. Entretanto, Shs1 não foi co-purificada com nenhum nucleotídeo ligado e apresentou-se como um monômero, independente de nucleotídeos em solução. O dímero Shs1-Cdc12 apresentou apenas GDP ligado, indicando que pelo menos uma subunidade é cataliticamente ativa no dímero. Diferentemente, Cdc11-Cdc12, apresentou-se ligado tanto a GDP quanto a GTP, como é comumente observado para heterodímeros de septinas onde apenas uma das subunidades é cataliticamente ativa. Já no ensaio de atividade GTPásica, Shs1 não mostrou nenhuma atividade catalítica quando GTP foi adicionado em excesso. Usando dicroísmo circular (CD), todas as proteínas mostraram-se enoveladas, com prevalência de α -hélices. Ainda por CD, foi possível observar maior estabilidade térmica do dímero Shs1-Cdc12 em relação à Shs1 monomérica, porém menor estabilidade se comparado ao dímero Cdc11-Cdc12. Por fim, foram obtidos cristais de Shs1 e também de Shs1-Cdc12, os quais foram congelados e serão submetidos à difração de raios X. Em suma, Shs1 não possui atividade catalítica enquanto um monômero, mas também não liga GTP mesmo quando parceira de Cdc12. Porém, aparentemente afeta a atividade catalítica de Shs1-Cdc12 em relação a Cdc11-Cdc12, ainda que a estabilidade térmica do primeiro dímero seja menor. Assim, informações estruturais obtidas a partir da estrutura destas proteínas deverão esclarecer o funcionamento e papel da Shs1 no bloqueio da polimerização de filamentos.

Palavras-chave: Septina. Polimerização. *Saccharomyces*.**Agência de fomento:** FAPESP (2022/00125-7)

Referências:

- 1 HARTWELL, L. Genetic control of the cell division cycle in yeast 11V:genes controlling bud emergence and cytokinesis. **Experimental Cell Research**, v. 69, n. 2, p. 265-276, Dec.. 1971. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0014-4827\(71\)90223-0](http://dx.doi.org/10.1016/0014-4827(71)90223-0).
- 2 MINO, A. *et al.* Shs1p: a novel member of septin that interacts with spa2p, involved in polarized growth insaccharomyces cerevisiae **Biochemical and Biophysical Research Communications**, v. 251, n. 3, p. 732-736, Oct. 1998. DOI: <http://dx.doi.org/10.1006/bbrc.1998.9541>.
- 3 GARCIA, G. *et al.* Subunit-dependent modulation of septin assembly: budding yeast septin shs1 promotes ring and gauze formation. **Journal of Cell Biology**, v. 195, n. 6, p. 993-1004, Dec. 2011. DOI: <http://dx.doi.org/10.1083/jcb.201107123>.

PG143

Mapeamento do campo elétrico em transistores poliméricos por espectroscopia SFG

SOUSA, Marcos Silva; GUNTHER, Florian Steffen; MIRANDA, Paulo Barbeitas

marcos.silva_sousa@ifsc.usp.br

Os transistores são o alicerce da eletrônica, assim como os transistores orgânicos por efeito de campo (ingl. *Organic Field-Effect Transistors*, OFETs) são a base da eletrônica orgânica. Muitos dos eventos físicos e químicos que ocorrem em dispositivos orgânicos ainda não são bem compreendidos, e isto é essencial para que possamos otimizar tanto o desempenho quanto a durabilidade dos dispositivos orgânicos. Por exemplo, saber como o campo elétrico é distribuído dentro das camadas dielétricas e semicondutoras de um OFET em operação é fundamental para que se possa comparar com previsões de modelos teóricos, e assim confirmá-los ou mesmo aprimorá-los. Existem algumas abordagens utilizadas para mapear o campo elétrico ao longo do canal do dispositivo. (1) Neste trabalho, utiliza-se para tal o fenômeno óptico não linear de geração de soma de frequências (do ingl. *Sum-Frequency Generation*, SFG) (2), que tem a vantagem de não danificar o dispositivo e nem alterar a distribuição de cargas sondada. No entanto, para atingir este objetivo, estudos preliminares são necessários. Sendo assim, até o momento, foram realizadas a fabricação e caracterização (elétrica e óptica) de OFETs baseados no semicondutor orgânico P3HT e no dielétrico PMMA. Os parâmetros do dispositivo foram obtidos das curvas de transferência e posteriormente comparados com a literatura. O valor obtido da mobilidade de efeito de campo no regime de saturação foi de $\mu_{\text{sat}} = 6,13 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{Vs}$, valor semelhante àqueles relatados na literatura (3). Para a caracterização óptica, empregamos a espectroscopia SFG para sondar o estiramento do grupo carbonila no dielétrico polimérico. As medidas de espectroscopia SFG mostraram uma dependência linear da amplitude do sinal SFG com a tensão de porta aplicada. Tais medidas SFG no canal de um OFET abrem a possibilidade de mapear a distribuição espacial de carga dentro do dispositivo em operação por microscopia SFG.

Palavras-chave: Transistores orgânicos por efeito de campo. Eletrônica orgânica. Óptica não linear.

Agência de fomento: CAPES (88887.506483/2020-00)

Referências:

- 1 BABAJANYAN, A. *et al.* Direct imaging of conductivity in pentacene field-effect transistors by a near-field scanning microwave microprobe. **Organic Electronics**, v. 12, n. 2, p. 263-268, 2011.
- 2 LAMBERT, A. G.; DAVIES, P. B.; NEIVANDT, D. J. Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: a tutorial review. **Applied Spectroscopy Reviews**, v. 40, n. 2, p. 103-145, 2005.
- 3 YANG, Y.; HONG, Y.; WANG, X. Utilizing the diffusion of fluorinated polymers to modify the semiconductor/dielectric interface in solution-processed conjugated polymer field-effect transistors. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 13, n. 7, p. 8682-8691, 2021.

PG144

Cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica, uma abordagem via NRG

DINIZ, Gustavo; OLIVEIRA, Luiz Nunes de

gustavodiniz0310@usp.br

A adsorção de partículas atômicas em superfícies metálicas é um processo de grande importância, tanto para estudos teóricos, como para aplicações práticas. A catálise e corrosão são dois temas que sobressaem nesse contexto. Ambos os fenômenos podem ser entendidos a partir do processo de colisão entre um átomo ou molécula e uma superfície. Qualitativamente o problema pode ser descrito por uma partícula, inicialmente neutra se aproximando da superfície metálica. A superposição entre os orbitais da partícula e os dos átomos na superfície cresce e possibilita transferência de carga do átomo para superfície. Quando um elétron é transferido a partícula passa a ter carga elétrica e consequentemente aparece um potencial de carga imagem, o que acelera a partícula em direção à superfície. Na colisão subsequente a geração de fônons e de pares elétron-buraco no metal rouba energia da partícula incidente, que pode ficar presa no potencial atrativo. Existe, portanto, uma probabilidade de que essa partícula seja adsorvida pela superfície. O desafio teórico é calcular essa probabilidade, que recebe o nome de coeficiente de adsorção S . O cálculo da contribuição dos pares elétron-buraco para S , em função da energia cinética inicial, é uma questão ainda aberta e constituirá o foco deste trabalho. Em trabalhos anteriores, foi mostrado que a aproximação de Born-Oppenheimer, tradicionalmente empregada, é pouco confiável, e que um cálculo completo empregando tratamento numérico preciso da função de onda dependente do tempo é necessário. Esse trabalho, entretanto, tem precisão limitada porque recorreu a uma aproximação de campo médio para descrever a interação entre o átomo e os elétrons da banda. Queremos aqui aperfeiçoar o cálculo, para isso, substituiremos a aproximação de campo médio por meio do método do grupo de renormalização numérico (NRG), que produz resultados essencialmente exatos. (1) A modelagem desse problema é realizada de forma simplificada pela incidência normal de um átomo de hidrogênio, inicialmente neutro, sobre a superfície de um metal, que será descrito por uma banda de condução sem estrutura. Para descrever esse sistema, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza. (2) Simplificadamente o procedimento para encontrar o S baseia-se em calcular o espectro de energias eletrônicas, utilizando NRG, para cada valor distância. No estado inicial, a partícula está longe da superfície, e sua função de onda é o produto entre o estado fundamental eletrônico e uma gaussiana centrada numa posição inicial, a qual descreve a parte nuclear. O procedimento de Crank-Nicolson (3) permite calcular a evolução temporal da função de onda, até que, depois da colisão, a função se divida em uma parte localizada perto da superfície e outra que se afasta dela. A integral espacial do módulo quadrado da primeira parte determina o coeficiente de adesão S .

Palavras-chave: Coeficiente de adsorção. NRG.

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

Referências:

- 1 REGO, C. R.; REQUIST, R.; GROSS, E. K. U.; OLIVEIRA, L. N. **Sticking coefficient for atoms scattering off metallic surfaces** (não publicado).
- 2 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, n. 2, p. 395, 2008.
- 3 CRANK, J.; NICOLSON, P.; HARTREE, D. R. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type, **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society** v. 43, n.1,p.50-67,1947.

PG145

Reconstrução de modelos radiativos da fonte central de raios gama do centro galáctico

MOMESSO, Daniel Cecchin; VIANA, Aion

daniel.cecchin@usp.br

Entre todos os ambientes de alta energia de nossa Galáxia, a região do Centro Galáctico é a mais rica, sendo HESS J1745-290 a sua fonte de raios- γ mais brilhante. (1) No entanto sua origem ainda é desconhecida, podendo estar relacionado a acreção no buraco negro central (Sgr A), a um vento de pulsares prolongado, ou outro tipo de fonte. Esse trabalho almejou investigar se a fonte central de raios- γ estaria ligada a aceleradores cósmicos de partículas, descobertos nessa região, capazes de acelerar partículas até energias de PeV, chamados de Pevatron. Neste cenário, a aceleração estocástica de prótons (até energias de PeV) interagindo com o campo magnético turbulento nas proximidades de Sgr A poderia produzir um fluxo de escape de prótons relativísticos que se difundem para fora interagindo com as nuvens moleculares que circundam essa região (2) produzindo o sinal de raios- γ observado. Para explorar tal hipótese foram modeladas a morfologia das nuvens moleculares no interior dos 10pc centrais de Sgr A, assim como a produção de raios- γ provenientes do decaimento de π^0 que são produzidos através da interação próton-próton dos raios cósmicos, que no processo de difusão se chocam com essas nuvens. Com a elaboração de um código computacional o fluxo de raios- γ foi calculado em dois cenários distintos, de uma fonte de raios cósmicos de injeção impulsiva e de injeção contínua. Em cada caso foi feita uma imagem 2D desses fluxos. E por fim ao se fazer a convolução dessas imagens obtidas com a resolução do futuro Cherenkov Telescope Array (CTA) e comparar ainda com uma terceira possibilidade de uma fonte de raios- γ puramente pontual se obteve diferentes morfologias para cada caso estudado. Pode-se inferir neste trabalho que o CTA, ao observar o Centro Galáctico, conseguirá diferenciar qual dos três cenários de emissividade de raios- γ está ocorrendo nesta região.

Palavras-chave: Astrofísica de altas energias. Raios cósmicos. Centro galáctico.

Agência de fomento: FAPESP (2022/04510-2)

Referências:

- 1 LONGAIR, M. S. **High energy astrophysics**. 3rd ed. New York: Cambridge University Press, 2011.
- 2 FERRIÈRE, K. Interstellar gas within ~ 10 pc of Sagittarius A*. **Astronomy and Astrophysics**, v. 540, p. A50-1-A50-21, Apr. 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201117181>.

PG146

Células solares orgânicas: estudo de estabilidade e degradação sob uso contínuo

FLOREZ, Yosthyn Ariza; FARIA, Gregorio Couto

ymariza@usp.br

As células solares orgânicas (do inglês organic solar cells - OSC) são dispositivos à base de moléculas pequenas ou polímeros conjugados, capazes de transformar energia luminosa em corrente elétrica.⁽¹⁾ Tais dispositivos têm atraído a atenção da comunidade científica pelo seu baixo custo de fabricação, compatibilidade com eletrônica flexível e eficiências que se aproximam ao do silício semicristalino. Apesar das altas eficiências obtidas recentemente a partir desta tecnologia, há uma enorme carência em trabalhos científicos que investiguem os processos de degradação das OSC, sob uso contínuo. Sendo assim, o presente projeto de mestrado foca no desenvolvimento e caracterização de dispositivos fotovoltaicos orgânicos, com o intuito de estudar a estabilidade e fenômenos de degradação sob operação contínua. Para este fim, utilizaremos camadas ativas produzidas a partir da blenda de P3HT - poli(3-hexiltiofeno) - com PC61BM - ácido [6,6]-fenil-C61-butírico. Aqui, propõe-se a realização de um estudo dividido em duas partes: a primeira é a fabricação de um equipamento que simule as condições ambientais sobre as quais as células solares são expostas e irão operar de forma contínua. Este equipamento deve fornecer uma radiação solar sob os padrões do filtro AM1.5G, que simula o espectro solar em regiões equatoriais. Além disso, pretendemos desenvolver e acoplar um controlador de temperatura, umidade e oxigênio, para que seja possível operar as células nas mais variadas condições climáticas (e, inclusive, realizar degradações aceleradas). Com o sistema de degradação construído, iremos operar ininterruptamente as células produzidas, até sua degradação completa. Durante o processo de funcionamento contínuo, curvas de corrente-voltagem serão extraídas do sistema a cada hora, sendo que a fotocorrente do sistema será monitorada continuamente. Células degradadas terão seus filmes poliméricos analisados por Microscopia de Força Atômica (AFM) e Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X (XPS), para avaliarmos a morfologia do filme e eventuais mudanças químicas na composição da blenda polimérica.

Palavras-chave: Células solares orgânicas. Blenda polimérica. Eficiência.

Agência de fomento: CAPES (88887.684425/2022-00)

Referências:

1 DOUMON, N. Y. **The degradation of organic solar cells: from chemistry to device physics through materials**. Groningen: University of Groningen.,2019. DOI:/10.33612/diss.98539626.

PG147

Nanopartículas biomiméticas revestidas com membranas celulares como estratégia inovadora na terapia do câncer de pulmão

BISTAFFA, Maria Julia; STERMAN, Raquel; CARDOSO, Valéria Maria de Oliveira; ZUCOLOTTI, Valtencir

mjbistaffa@ifsc.usp.br

O câncer de pulmão é o segundo de maior incidência mundial, com uma estimativa de 2,2 milhões de novos casos e 1,8 milhões de mortes durante o ano de 2020. (1) Os derivados da platina, como a cisplatina, são quimioterápicos utilizados há mais de 40 anos no tratamento de câncer de pulmão, e até hoje sua aplicação clínica enfrenta problemas relacionados aos efeitos adversos crônicos dependentes da dose. A distribuição não seletiva e a resistência adquirida das células tumorais tornam necessário a administração de elevadas doses, contribuindo para a toxicidade das células normais e saudáveis adjacentes. (2) A nanotecnologia representa um grande avanço para as áreas terapêuticas e diagnósticas voltadas às neoplasias. Nanopartículas a base de polímeros, como o poli (ácido lático-co-ácido glicólico; PLGA), são alternativas promissoras para o tratamento do câncer, devido à sua não-toxicidade, biocompatibilidade, biodegradabilidade e baixo custo. A fim de escapar do sistema imunológico e alcançar o tecido tumoral, as nanopartículas podem ser revestidas com membranas celulares. (3) Essa estratégia oferece especificidade às células de interesse, contribuindo para menor toxicidade nas células adjacentes saudáveis. Este projeto de doutorado tem como objetivo o desenvolvimento de nanopartículas (NP) de PLGA contendo cisplatina revestidas com membranas híbridas de linfócitos T e de células tumorais pulmonares (A549) como estratégia inovadora na terapia contra o câncer de pulmão. As células A549 expressam alto índice de proteínas de adesão em superfície que contribuem para o direcionamento específico das nanoestruturas ao sítio tumoral. Adicionalmente, as membranas de linfócitos T são favoráveis à evasão de barreiras biológicas do próprio sistema imune fagocitário. As NPs e o revestimento com as membranas celulares foram fabricados através da nanoprecipitação e extrusão, respectivamente. De acordo com a microscopia eletrônica de varredura, as partículas possuem formato esférico e superfície lisa. A caracterização utilizando espalhamento de luz dinâmico (DLS) revelou partículas com diâmetros nanométricos, aproximadamente 140 ± 10 nm, com índice de polidispersividade (PDI) de 0,07, indicando a distribuição homogênea das partículas. O revestimento com membrana celular híbrida não altera o diâmetro, entretanto, há um deslocamento significativo da carga superficial de -30 mV para -5 mV conforme medidas de potencial zeta, o que sugere a interação entre membrana e a partícula. Para as próximas etapas serão realizados estudos de eficiência de encapsulação e perfil de liberação, utilizando cromatografia líquida para quantificação do fármaco. A partir desses estudos será possível avaliar o perfil citotóxico in vitro em células tumorais (A549) e saudáveis (MRC-5).

Palavras-chave: Nanopartícula polimérica. Cisplatina. Membranas híbridas.

Agência de fomento: CAPES (88887.670930/2022-00)

Referências:

- 1 SUNG, H. *et al.* Global cancer statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries, **CA: Cancer Journal Clinical**, v.71,n.3,p.209-249,2021. DOI:0.3322/caac.21660.
- 2 SHARMA, P. *et. al.* Emerging trends in the novel drug delivery approaches for the treatment of lung cancer, **Chemical Biological Interactions**. v.309,p.108720,2019.DOI:10.1016/j.cbi.2019.06.033.
- 3 JIANG,Q. *et al.* Erythrocyte-cancer hybrid membrane-camouflaged melanin nanoparticles for enhancing photothermal therapy efficacy in tumors, **Biomaterials** v.192,p. 292–08,2019.DOI:10.1016/j.biomaterials.2018.11.021.

PG148

Near infrared optical thermometry in fluorophosphate glasses doped with Nd^{3+} and $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$

FARIA, Walter; CAMARGO, Andrea de; GONÇALVES, Tássia

walter.faria@usp.br

Optical thermometry via luminescence intensity ratio (LIR) (1-2) is often explored in the visible spectrum range of trivalent rare earth doped materials but much less so in the near infrared region. This work range, which can be explored in Nd^{3+} and Yb^{3+} doped materials, overlaps with the first and second biological window thus making these thermometers interesting for bio applications. In this work (3), proof of concept is given by developing highly sensitive optical thermometers based on Nd^{3+} -singly doped and $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ -co-doped fluorophosphate glasses with superior optical properties than phosphate and fluoride glasses. The developed systems offer the possibility of simultaneously using two LIR as thermometric parameters with high measurement accuracy, in wide temperature ranges. The Nd^{3+} -based thermometer operating via three energy level sets emitting in the 730–950 nm range has relative sensitivities spanning from 1.7% K^{-1} (at room temperature) to 0.6% K^{-1} (at 520 K). The $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ system presents, in addition to the use of Nd^{3+} transitions LIR, a new possibility of temperature detection up to 520 K. A decreased intensity of the zero-phonon line of Yb^{3+} at 975 nm was detected and used by comparison to the Nd^{3+} emission around 800 nm, resulting in relative sensitivities of $\sim 2\% \text{ K}^{-1}$ at room temperature.

Palavras-chave: Luminescence. Thermometry. Lanthanides.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 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, p. 4743, 2003.
- 2 SUTA M., MEIJERINK, A. A Theoretical framework for ratiometric single ion luminescent thermometers - thermodynamic and kinetic guidelines for optimized performance. **Advanced Theory and Simulations**, v. 3, n.12, p. 2000176, 2020.
- 3 FARIA, W.J., GONÇALVES, T.S., CAMARGO, A. S.S.de , Near infrared optical thermometry in fluorophosphate glasses doped with Nd^{3+} and $\text{Nd}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$, **Journal of Alloys and Compounds**, v. 883, p.160849, 2021.

PG149

Formulação para cálculo de campo magnético e homogeneidade em ímãs de RMN que apresentam configuração geométrica “H” circular tri-dimensional.

BERNARDES, Diego Firme; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro

diegobernardes.engfisica@gmail.com

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma técnica que se popularizou por seu grande potencial como método de diagnóstico na medicina. Entretanto, a referida técnica é amplamente utilizada em outras áreas de ciência e tecnologia como, por exemplo, na indústria química e bioquímica, auxiliando na caracterização físico-química de compostos e materiais; no agronegócio para avaliar e certificar a qualidade de alimentos; na indústria do petróleo, auxiliando na prospecção e caracterização de petróleo e derivados, além de outras diversas aplicações acadêmicas em Física, Química e Engenharia. Uma parte fundamental do equipamento de RMN é o ímã, sendo que este campo magnético pode ser gerado por eletroímãs, feito de condutores convencionais ou supercondutores, ou ímãs permanentes. Cada tipo de ímã citado anteriormente apresenta vantagens e desvantagens quando comparados entre si. Todavia, com a descoberta de novos processos capazes de gerar magnetos permanentes com valores de campo remanente e coercividade elevados a partir de ligas de samário cobalto (SmCo) e o neodímio ferro boro (NdFeB), este tipo de ímã tem se tornado cada vez mais comum. Uma das principais vantagens dos ímãs permanentes é possibilidade de criar configurações geométricas, ou seja, formas de arranjar estes magnetos permanentes para obter campos magnéticos elevados e com valores de homogeneidade razoáveis (da ordem de partes por bilhão). Entre os arranjos geométricos mais comuns podemos destacar a configuração em “H”, que consiste em duas peças de magnetos permanentes, conectadas em uma de suas extremidades por uma estrutura de aço com baixo teor de carbono (yoke). Em casos onde se deseja campos altamente homogêneos é utilizada uma peça de aço sobre as peças magnéticas, denominadas peças polares. Embora outras geometrias mais complexas têm se tornado comuns, a geometria H ainda é amplamente utilizada principalmente devido a sua simplicidade. No entanto, ao contrário de outras geometria, não é encontrado na literatura equações analíticas (ou gráficos) que permitam estimar o valor do campo magnético e da homogeneidade em função dos parâmetros físicos e geométricos da estrutura, o que permitiria aos construtores de ímãs ter um direcionamento no início de tais projetos. Portanto, o foco principal desta dissertação foi discutir procedimentos e condições que levem a determinação de gráficos e equações analíticas parametrizados por aspectos de construção de ímãs em geometria H que permitam estimar a intensidade de homogeneidade do campo magnético produzido com essas estruturas. Testamos modelagens utilizando circuitos magnéticos e integração direta baseado na Lei de Ampère, sendo que somente no segundo caso obtivemos uma parametrização factível para uso em modelos de ímãs com características adequadas para RMN. (1-2)

Palavras-chave: Ímãs de RMN. “H” circular tri-dimensional.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 NAGATA, A. *et al.* Development of an outdoor MRI system for measuring flow in a living tree, **Journal of Magnetic Resonance**, v. 265, p. 129-138, 2016.
- 2 MITCHELL, J. *et al.* Low-field permanent magnets for industrial process and quality control. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 76, p. 1-60, 2014.

PG150

Spontaneous scalarization in the presence of magnetic fields

CAPOBIANCO, Rogério; HARTMANN, Betti

rogerio.capobianco@gmail.com

The phenomenon known as “Spontaneous Scalarization”, a deviation of Einstein’s field equations that arise once a certain threshold in curvature is exceeded, and hence circumventing the no-hair theorems, has attracted lots of attention recently due to the possibility of allowing scalarized solutions to exist while the weak field regime is still unchanged. It was first described for neutron stars, in which a massless scalar field is coupled to a traceless energy-momentum tensor. This approach was generalized to massive scalar fields, and recently generalized to vacuum solutions of Einstein’s field equations. In the latter, the process can be triggered by a coupling between the scalar field and a matter content, such as the electromagnetic tensor, as well as high-order curvature terms, like the Gauss-Bonnet invariant. Furthermore, it has been shown that the phenomenon appears even in the absence of a compact object. Melvin Universe, which describes a self-gravitating magnetic field, can undergo spontaneous scalarization for magnetic as well as high curvature couplings (see 1 and references therein). (1) The above suggests that these two couplings are qualitatively different in nature. In this project, we aim to contribute to this discussion by considering a solution describing an uncharged black hole immersed in a magnetic field.

Palavras-chave: Generalized theories of gravity. Black holes. Spontaneous scalarization.

Agência de fomento: CAPES (88887.371717/2019-00)

Referências:

1 BRIHAYE, Y.; CAPOBIANCO, R.; HARTMANN, B. Spontaneous scalarization of self-gravitating magnetic fields. **Physical Review D** v. 103, n. 12, p. 124020, 2021.

PG151

Validação de um método analítico inovador para quantificação simultânea do erlotinibe e cisplatina a partir de nanovesículas biomiméticas

STERMAN, Raquel; BISTAFFA, Maria Julia; CARDOSO, Valéria Maria de Oliveira; ZUCOLOTTO, Valtencir

raquelsterman@usp.br

O câncer é considerado, mundialmente, uma das principais causas de morte. O carcinoma de pulmão está entre as formas mais letais da doença, com cerca de 1,8 milhões de óbitos registrados em 2020. (1) Avanços recentes em nanotecnologia vêm ganhando destaque ao utilizarem componentes principais da membrana de células tumorais para camuflar sistemas de entrega de fármacos das células fagocíticas e aumentar sua especificidade e atividade nos sítios alvos. (2) Esta técnica permite contornar as dificuldades encontradas nos tratamentos tradicionais, como a resistência aos quimioterápicos e os efeitos colaterais em células saudáveis e imunes devido à sua alta toxicidade. Este trabalho propõe a utilização de nanovesículas (NV) biomiméticas, formadas a partir dos componentes principais da membrana celular de carcinoma pulmonar (A549), para entrega dirigida de pequenas doses dos antitumorais, cisplatina e erlotinibe, no câncer de pulmão. Um dos aspectos mais importantes no desenvolvimento de sistemas para liberação de fármacos é a quantificação. Validar um método analítico é fundamental para práticas laboratoriais de qualidade, além de assegurar que o método desenvolvido é confiável quanto aos resultados gerados e apropriado para o uso pretendido. No presente estudo, um método para quantificação simultânea do erlotinibe e cisplatina foi desenvolvido e validado utilizando-se cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE). Os parâmetros de validação avaliados foram: especificidade/seletividade, linearidade, precisão, exatidão, limite de detecção (LD) e limite de quantificação (LQ) conforme preconizado pela Conferência Internacional de Harmonização (ICH). Os métodos desenvolvidos se mostraram seletivos e específicos, lineares (r^2 Cisplatina = 0,999; r^2 Erlotinibe = 0,999), precisos, exatos e capazes de detectar e quantificar baixíssimas concentrações de fármaco nos meios testados. A partir dos ensaios experimentais, foi possível comprovar a adequação do método analítico desenvolvidos ao uso pretendido, sendo que os métodos atenderam todas as exigências previstas, portanto, os resultados obtidos através deles são confiáveis e reprodutíveis. Para as próximas etapas, estudos para avaliar a capacidade de internalização do nanossistema nas células será analisada, quantitativamente e qualitativamente, por citometria de fluxo e microscopia confocal, respectivamente. Seu potencial antitumoral será avaliado por meio de ensaios in vitro de viabilidade, apoptose/necrose e espécies reativas de oxigênio (ROS) em células de pulmão saudáveis (MCR5) e tumorais (A549). Ao final do trabalho espera-se que o encapsulamento dos fármacos em NV biomiméticas se mostre essencial para melhorar a biossegurança e potencializar a atividade antitumoral do tratamento.

Palavras-chave: Câncer. Nanovesículas biomiméticas. Cisplatina.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 SUNG,H. *et.al.* 2021 Global cancer statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries **CA: a cancer journal for clinicians** v.71,p. 209–49,2021.
- 2 KROLL, A. V.; FANG, R. H.; ZHANG, L. Biointerfacing and applications of cell membrane-coated nanoparticles, **Bioconjugate Chemistry** v.28,n.1,p.23-32,2017.

PG152

Produção de H₂ verde a partir da dissociação fotocatalítica da água utilizando a heterojunção p – n SrTiO₃/NiO@Ni(OH)₂

CENTURION, Higor Andrade; GONÇALVES, Renato Vitalino; RABELO, Lucas Gabriel

higorcenturion@usp.br

A utilização de combustíveis fósseis como principal matriz energética pode estar associada a uma série de desbalanços ambientais. Deste modo, buscas por fontes renováveis e livres de emissão de CO₂, apontam o hidrogênio verde como uma promissora alternativa aos combustíveis de base fóssil. (1) Nesta perspectiva, o SrTiO₃ vem recebendo grande destaque como fotocatalizador em reações de dissociação fotocatalítica da água, contudo, certas limitações intrínsecas deste material semiconductor, como largo bandgap óptico ($\sim 3,2$ eV), baixa separação de cargas e altas taxas de recombinação de elétrons e buracos fotogerados, minimizam seu potencial fotocatalítico. (2) De modo a suprimir as limitações supracitadas, utilizou-se de molibdênio como dopante, buscando deslocar a absorção óptica deste fotocatalizador para a região do visível, e deposição via pulverização catódica de nanopartículas de níquel como cocatalizador, formando uma heterojunção p – n, resultando em um ganho fotocatalítico, para evolução de H₂, em mais de 30 vezes, sob irradiação AM 1.5G ou mesmo atividade fotocatalítica sob apenas irradiação de luz visível (> 400 nm). Nesta perspectiva, além de maximizar a atividade fotocatalítica do SrTiO₃, este trabalho visa elucidar os mecanismos que levam a este excepcional ganho fotocatalítico. Simulações por DFT, apontam para a formação de níveis eletrônicos intermediários próximos a banda de valência, associados a inserção do Mo como dopante, ao qual é possível atribuir a atividade fotocatalítica sob luz visível. Quanto ao uso de níquel como cocatalizador, resultados de XPS apontam para a formação de uma estrutura NiO/Ni(OH)₂, o que juntamente com resultados de Mott-Schottky e UV-Vis, possibilitou a realização de simulações de dobramentos de bandas. A análise do alinhamento de bandas indica que a estrutura resultante se trata de uma heterojunção do tipo II, no qual ocorre a formação de um campo elétrico interno, responsável por conduzir os buracos fotogerados para a estrutura de NiO, propiciando assim uma melhor separação de cargas e consequentemente, redução nas taxas de recombinação de elétrons e buracos, confirmada por análises de fotoluminescência. Os resultados obtidos, contribuem fortemente para a compreensão dos mecanismos de dissociação fotocatalítica da água utilizando o SrTiO₃ dopado com Mo e decorado com nanopartículas de níquel.

Palavras-chave: SrTiO₃. H₂ verde. Dissociação fotocatalítica.

Agência de fomento: FAPESP (2018/11059-0)

Referências:

- 1 GONÇALVES, R.V. *et. al.* Photocatalytic water splitting by suspended semiconductor particles, *In* : SOUZA, F. L.; LEITE, E.R.(eds) **Nanoenergy**, New York: Springer International Publishing, 2018.p. 107–140.
- 2 PATIAL, S. *et. al.* Tunable photocatalytic activity of SrTiO₃ for water splitting: Strategies and future

scenario, **Journal Environmental Chemical Engineering**, v. 8,n.7,p.103791, Feb.2020.

PG153

Caracterização da sensibilidade visual de peixes elétricos de campo fraco: instrumentação eletrofisiológica dedicada não-invasiva aplicada à neuroetologia

BELLINI, Beatriz Saiani; PINTO, Reynaldo Daniel; ALMEIDA, Lirio Baptista de

beatriz.bellini@usp.br

A espécie de peixe elétrico de campo fraco *Gymnotus carapo* possui um órgão gerador de pulsos elétricos, que se propagam na água ao seu redor, e um sistema sensorial elétrico espalhado pelo corpo, ambos integrados a seu sistema nervoso central, constituindo o que pode ser considerado um “sentido elétrico”. Por conta disso, estes animais são capazes de mapear seus arredores através de deformações no campo elétrico autogerado e estabelecer comunicação com seus coespecíficos, processos chamados de eletrolocalização e eletrocomunicação, respectivamente. (1-2) O sentido elétrico destes animais é muito sensível a diversos tipos de estímulo, reagindo imediatamente a novas percepções com acelerações transientes dos pulsos de seu órgão elétrico, o que é conhecido como *Novelty Response* (NR). (3) Entretanto, enquanto este sentido já foi caracterizado em diversos trabalhos, outras modalidades sensoriais foram pouco exploradas. Além disso, mesmo que a NR seja um comportamento natural conhecido há várias décadas, sua utilização para inferir a percepção de outras modalidades sensoriais é uma novidade que só foi possível com a aplicação de técnicas experimentais, desenvolvidas em nosso laboratório, que não restringem os movimentos do animal no aquário de experimentos. Dessa forma, este trabalho visa quantificar de maneira não invasiva a sensibilidade visual de *G. carapo* em relação a diferentes características de estímulo, utilizando as NRs como indicação de que os estímulos foram percebidos pelos animais. Para isso, foi desenvolvido um aparato experimental capaz de gerar oito tipos de pulso luminoso, com comprimentos de onda correspondentes ao infravermelho, vermelho, verde e azul, e em dois valores de intensidade. O *setup* permite a apresentação dos estímulos em uma ordem aleatória e durante um longo período de tempo, além da gravação do sinal elétrico dos animais. Os resultados obtidos indicam que a espécie tem sensibilidade para os comprimentos de onda no espectro visível apresentados, em ambas as intensidades luminosas. Os próximos passos do projeto visam o aprofundamento dessas explorações, para que seja possível estabelecer a dependência de resposta em relação à variação de intensidade de estímulo, bem como determinar a faixa do espectro luminosos que sensibiliza o sistema visual de *G. carapo*.

Palavras-chave: *Gymnotus carapo*. Novelty response. Sistema visual.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

1 FORLIM, C. G.; PINTO, R. D. Automatic realistic real time stimulation/recording in weakly electric fish: long time behavior characterization in freely swimming fish and stimuli discrimination. **PLOS ONE** v. 9, n.1, p. e84885, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0084885>.

2 VON DER EMDE, G. Active electrolocation of objects in weakly electric fish, **Journal Experimental Biology** v.202, p.1205-1215, 1999.

3 CAPUTI, A. A.; AGUILERA, P. A.; CASTELLÓ, M. E. Probability and amplitude of novelty responses as a function of the change in contrast of the reafferent image in *G. carapo*. **Journal Experimental Biology** v.206, n.6,p.999–1010, 2003. DOI: /10.1242/jeb.00199.

PG154

Purificação quântica através de um estado quádruplo para incluir ruído ambiental e aparato de medida na investigação do conceito de complexidade quântica

AUDI, Gabriel; NAPOLITANO, Reginaldo

gabriel.nogueira.monteiro@usp.br

Utilizando as definições usuais de complexidade quântica como guias (1-2), neste mestrado investigamos como poderia ser generalizada a complexidade quântica de um algoritmo quântico, sob a influência ruidosa do ambiente. Para poder tratar esse problema introduzimos uma purificação e através do formalismo geométrico da complexidade quântica, estudamos a complexidade quântica no espaço purificado considerando uma interação de defasagem pura entre o ambiente e os qubits.

Palavras-chave: Complexidade. Ruído. Purificação.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 NIELSEN, M. A. *et al.* Quantum computation as geometry. **Science**, v. 311, n. 5764, p. 1133-1135, 2006.

2 BROWN, A. R.; SUSSKIND, L. Complexity geometry of a single qubit. **Physical Review D**, v. 100, n. 4, p. 046020-1-046020-20, 2019.

PG155

Caracterização óptica e bioquímica da melanina – estudo comparando a melanina sintética e biológica

SOUZA, Giancarlo; GUIMARAES, Francisco Eduardo; KURACHI, Cristina

giancarlo.souza@usp.br

A melanina é um termo que agrupa uma série de pigmentos naturais encontrados em diversos organismos. A principal função biológica da melanina é a fotoproteção por apresentar alta absorção e espalhamento da radiação eletromagnética no espectro visível. (1-2) Neste contexto, o entendimento dos mecanismos de formação das moléculas de melanina, as organelas em quais elas são agregadas (melanossomos) e suas propriedades ópticas é de fundamental importância para a implementação de melhorias no diagnóstico e tratamento empregando técnicas ópticas. O objetivo deste trabalho é realizar a caracterização óptica de melanina produzida por células de melanoma murino *in vitro* (linhagem B16F10) e de melanina sintética a fim de compreender a estrutura físico química desta molécula no interior de sistemas biológicos. Para isso, foram definidos três grupos de estudo para caracterização da melanina natural: melanina extraída das células, melanina no interior de melanossomos isolados de dentro da célula e melanina no interior de melanossomos extracelulares. Foi definido um protocolo de isolamento de melanossomos interiores às células baseados em estudos encontrado na literatura (3) e foram realizadas medidas de microscopia confocal de varredura com excitação por dois fótons nas amostras a fim de definir um padrão de emissão e de tempo de vida de fluorescência que possibilitam diferenciar as amostras. Resultados preliminares mostraram diferença de 10% em um dos picos de emissão entre os melanossomos extracelulares e isolados das células. Os próximos passos para este trabalho envolve a definição de um padrão de absorção, espalhamento, atividade antioxidante e de tempo de vida de fluorescência a fim de entender-se a forma de agregação de moléculas de melanina e como elas interagem com a luz dentro e fora de um sistema biológico simples.

Palavras-chave: Melanina. Melanoma. Caracterização óptica.

Agência de fomento: CNPq (381101/2022-3)

Referências:

- 1 KAXIRAS, E.; TSOLAKIDIS, A.; ZONIOS, G.; MENG, S. Structural model of eumelanin. **Physical Review Letters** v.97,n.21,p.218102,Nov. 2006. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.218102.
- 2 HUANG, Y. *et al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological Chemistry**, v. 394, n. 2, p. 239–250, Jan. 2013.
- 3 AKAZAKI, S. *et al.* Three-dimensional analysis of melanosomes isolated from B16 melanoma cells by using ultra high voltage electron microscopy. **Microscopy Research** v.2,n.1, p.1–8,Jan.2014.

PG156

Extração de informações biológicas de redes a partir de medidas topológicas

SANTOS, João Paulo Cassucci dos; BRUNO, Odemir Martinez

joao.cassucci@usp.br

O fungo *Aspegillus fumigatus* é um agente patológico que pode causar infecções no tecido epitelial pulmonar de pessoas imunocomprometidas, e que tem desenvolvido resistência a fungicidas, aumentando o risco de crises sanitárias. O projeto tem como objetivo utilizar-se de redes metabólicas a partir de experimentos de expressão genética do *A. fumigatus* de modo a prever novas relações funcionais entre genes, elucidando melhor a sua resposta metabólica a fungicidas. O banco de dados utilizado como base para este projeto veio de experimentos de RNA-Seq do fungo selvagem e de mutantes expostos ao fungicida Caspofungin em diferentes períodos de exposição. As redes metabólicas foram montadas utilizando-se do método de “Highest Reciprocal Ranking” (1), que baseia-se na correlação de Pearson para estabelecer arestas entre genes, e extrair possíveis informações biológicas com base na coexpressão dos genes associados. As redes montadas foram divididas em clusters, que foram caracterizados como enriquecidos ou não em termos biológicos com base no banco de dados STRING. Com as redes caracterizadas, foi possível então, utilizar-se de algoritmos desenvolvidos pelo grupo de visão computacional para obter medidas topológicas das redes que possam diferenciar aquelas que estavam enriquecidas das não-enriquecidas. Entre estes algoritmos estão o LLNA (Life-Like Network Automata) (2) e RNN (Random Neural Network) (3), dois métodos capazes de extrair características de redes complexas que são de difícil caracterização convencionalmente. Estas características foram utilizadas por algoritmos de inteligência artificial para treinamento e teste de modo a obter um modelo matemático capaz de prever se a rede fornece informações biológicas ou é meramente um artifício matemático. Este modelo será útil na predição de funções biológicas de genes desconhecidos que se relacionam com genes já caracterizados através do princípio de “guilt-by-association”.

Palavras-chave: Redes complexas. Inteligência artificial. Bioinformática.

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

Referências:

- 1 LIESECKE, F. *et al.* Ranking genome-wide correlation measurements improves microarray and RNA-seq based global and targeted co-expression networks. **Scientific Reports**, v.8, n.1, p.10885,2018.
- 2 MIRANDA, G. H. B.; MACHICAO, J. Exploring spatio-temporal dynamics of cellular automata for pattern recognition in networks. **Scientific Report s**,v. 6, p.37329,2016.
- 3 RIBAS, L. C. *et al.* Fusion of complex networks and randomized neural networks for texture analysis. **Pattern Recognition**, v.103,p.107189,July 2020.

PG157

Simulação de interação através do mapa de Dyson

SILVA, Luís; MOUSSA, Miled

silvaluis@usp.br

A hipótese de que um hamiltoniano não-hermitiano pode descrever um sistema físico fechado, desde que ele apresente uma simetria antilinear (1) e seja pseudo-hermitiano (2), possibilitou a previsão de efeitos intrigantes que não podem ser observados no limite hermitiano, por exemplo, a compressão infinita de estados do campo de radiação em tempos finitos. Um hamiltoniano H é denominado pseudo-hermitiano se existe um operador positivo-definido ρ , denominado métrica, tal que a relação $\rho H = H^\dagger \rho$ seja satisfeita. Além disso, a formulação da teoria quântica que descreve sistemas pseudo-hermitianos requer uma definição do espaço de Hilbert com um produto interno modificado $\langle \cdot | \cdot \rangle_\rho = \langle \cdot | \rho | \cdot \rangle$. Efeitos igualmente intrigantes também podem aparecer quando estamos no limite hermitiano, pois a definição de pseudo-hermiticidade não exige que H seja não-hermitiano. Para esclarecer este fato, notamos que a modificação da métrica do espaço é equivalente à realização de uma transformação não-unitária η sobre o sistema, seja ele hermitiano ou não. Esta transformação mapeia H no hamiltoniano transformado $h = \eta H \eta^{-1}$, um operador hermitiano. O operador η , denominado mapa de Dyson, é necessariamente não-unitário e define tanto a métrica do sistema $\rho = \eta^\dagger \eta$ quanto os novos observáveis $\eta^{-1} o \eta$, onde o denota os observáveis na métrica usual (operador identidade). Neste trabalho, demonstramos que é possível simular uma interação átomo-campo, através da escolha apropriada do mapa de Dyson η , em um sistema hermitiano constituído por um átomo de 2 níveis e um modo do campo eletromagnético, no qual átomo e campo não interagem. No entanto, ainda é necessário um esquema experimental que possibilite a observação dos efeitos provenientes da modificação da métrica do espaço e, conseqüentemente, a simulação da interação átomo-campo. Acreditamos que isso pode ser alcançado através dos protocolos de medidas fracas introduzido por Aharonov-Albert-Vaidman (3) e que viabiliza a medida de operadores não-hermitianos.

Palavras-chave: Simulação de interação. Métrica. Medidas fracas.

Agência de fomento: CAPES (88887.684394/2022-00)

Referências:

- 1 BENDER, C. M.; BERRY, M. V.; MANDILARA, A. Generalized PT symmetry and real spectra. **Journal of Physics A : mathematical and general**, v. 35, n. 31, p. L467-L471, 2002.
- 2 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-hermiticity versus PT symmetry: the necessary condition for the reality of the spectrum of a non-hermitian hamiltonian. **Journal of Mathematical Physics**, v. 43, n. 1, p. 205-214, 2002.
- 3 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. 1351-1354, 1988.

PG158

Nanopartículas de fuligem isoladas agindo como uma fonte eficiente de oxigênio singleto: efeitos da agregação molecular e sua estrutura energética

VICENTE, Maria Luiza Ferreira; PRADO, Ana Glavocic de Almeida; SANTOS, Nathália Villa dos; VERAS, Mariana Matera; PRATAVIEIRA, Sebastião; SALDIVA, Paulo; GUIMARAES, Francisco Eduardo Gontijo

maria.luiza.vicente@usp.br

As nanopartículas de fuligem (NP) possuem propriedades que as tornam capazes de agir como fotossensibilizadores (do inglês - *photosensitizer* - PS), neste trabalho, mostramos que estas são uma fonte eficiente de oxigênio singleto (1O_2) com 1O_2 quantum yield dependente das múltiplas etapas fotofísicas que regem a transferência de energia dos estados tripletos no volume para sua superfície.(1) O material foi coletado por filtragem do ar da cidade de São Paulo (FNP), obtido diretamente do escapamento de ônibus (DEP) ou pulmão humano (LNP) e a morfologia foi analisada pela Dispersão Dinâmica de Luz (do inglês - *Dynamic Light Scattering* - DLS) e Microscopia eletrônica de Transmissão (do inglês - *Transmission Electronic Microscopy* - TEM). Suspendemos as subunidades formadoras da fuligem em uma solução aquosa alcalina e outra neutra, a microscopia confocal foi usada para caracterizá-las em termos de sua emissão, componentes de absorção e espalhamento de dois fótons (2P), bem como uma medida indireta da capacidade de gerar 1O_2 nos respectivos meios, usando uma sonda fluorescente padrão. As nanopartículas suspensas são centros espalhadores eficientes, sendo os comprimentos de onda mais curtos mais sensíveis ao espalhamento ($A\lambda^{-1}$). Usando essa relação com $n = 1$, determinamos pela primeira vez através de uma medida direta, a fração de absorção de uma subunidade nanométrica de fuligem que se estende do ultravioleta (250 nm) ao infravermelho próximo (800 nm). A absorção nos domínios do visível e infravermelho tem origem em suas transições ópticas de agregados moleculares estáveis de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs) do tipo J. Por outro lado, a absorção ultravioleta está mais provavelmente relacionada aos agregados moleculares do tipo H, uma vez que estes são extremamente seletivos para excitação 2P. Para pHs mais ácidos, o tamanho do aglomerado causa um *red shift* no espectro de absorção. Mostrou-se que o arranjo espacial dos HPAs favorecem a formação de estados tripletos dentro do volume das nanopartículas e guiam esses estados excitados eficientemente para sua superfície através de processo de transferência de energia ao longo de uma estrutura energética semelhante a uma escada. Essas condições são necessárias para gerar oxigênio singleto com 34% de eficiência em um meio aquoso. A ampla densidade dos estados agregados causa o *repump* do *photon up-conversion* e promovem a migração do estado excitado fazendo com que o espectro de emissão de fluorescência mude para o vermelho, cuja forma de linha é determinada pela densidade dos estados nesta faixa espectral.(2) No presente trabalho mostramos que a dispersão de luz domina os processos ópticos de nanopartículas de fuligem suspensas em meio aquoso com características espectrais únicas da forma $A\lambda^{-1}$. Os estados eletrônicos moleculares responsáveis pela absorção óptica foram obtidos a partir da subtração da dispersão originárias de agregados de HPAs, conforme revelado por medidas de absorção seletiva de 2P. A estrutura espacial dos estados agregados nas nanopartículas é responsável por todos os processos fotofísicos (*up-conversion*, *red emission*) e fotoquímicos (geração de 1O_2). Todas essas características são encontradas em FNP, DEP e LNP, o que permite sua identificação

inequívoca em tecidos humanos e no ambiente.(3)

Palavras-chave: Oxigênio singleto. Nanopartículas de poluição. Photon up-conversion.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 OSSOLA, R. *et al.* Singlet oxygen quantum yields in environmental waters. **Chemical Reviews** v.121,p.4100-4146, Apr.2021.

2 TU, Y. *et al.* Aggregate science: much to explore in the meso world. **Matter**, v. 4, n. 2, p. 338-349, 2021.

3 BOVE, H. *et al.* Ambient black carbon particles reach the fetal side of human placenta. **Nature Communications** v. 10, n.3866,2019.

PG159

Dinamica do quench em condensados de Bose - Einstein em átomos de sódio.

ANDRADE, Matheus; HENN, Emanuel Alves de Lima

matheus_aryl@ifsc.usp.br

A condensação de Bose Einstein, possui diversas etapas subsequentes para criação do sistema necessário. Os condensados são sistemas macroscópicos, que no processo gerado em laboratório, mostram o comportamento quântico da matéria. (1) Nesta tese, será apresentado o processo de realização do sistema experimental capaz de produzir um condensado de Bose-Einstein em átomos de sódio, explicar os conceitos físicos clássicos para o quântico, sob as transições realizadas, os princípios de probabilidade e estatística do gás ideal e real, que geraram formulações matemáticas possíveis, como a denominada estatística de Bose Einstein; as interações das partículas e as introduções de fórmulas e equações importantes, como a equação de Gross – Pitaevskii, Equação de Schrodinger, De Broglie, dentre outras. Neste trabalho contém também as técnicas sobre o sistema para a descrição das ocorrências do processo de condensação, gerando dados que estão sendo realizados e plotados detalhadamente. A análise dos dados tem como objetivo, investigar a natureza do sistema gerado, realizando um Quench; uma mudança súbita ou lenta da dinâmica do sistema do condensado; mantendo o sistema original, não ocorrendo a criação de defeitos topológicos na nuvem. (2) Nos dados obtidos, que estão em análise, será produzido gráficos que possibilitaram a visualização do tempo de Quench, a estrutura do sistema, do processo da possível transição de fase, que possibilitará visualizar o processo de adiabaticidade, defeitos topológicos na estrutura do sistema, dentre outros; das quantidades de cada dado específico coletado, fazendo assim um parâmetro de controle. (2-3) Nos elementos obtidos, para análise dos dados, serão plotados baseados no número total de átomos na nuvem, número de átomos térmicos, número de átomos no BEC, as larguras das Gaussianas e seus respectivos erros, os raios de Thomas Fermi e seus respectivos erros, a Temperatura baseada no sigma da nuvem térmica e plotar baseado na fração de átomos condensados medidos pela razão do número de átomos. Assim finalizando os estudos iniciais.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Quench. Defeitos topológicos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 LIU, IK. *et al.* Dynamical equilibration across a quenched phase transition in a trapped quantum gas. **Communications Physics**, v 1, n. 24, 2018. DOI:10.1038/s42005-018-0023-6.
- 2 DENG, T. *et al.* Quench dynamics of a Bose-Einstein condensate under synthetic spin-orbit coupling. **Physical Review A**, v. 93, n. 5, p. 053621, 2016.
- 3 KETTERLE, W. *et al.* **Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates.** 1999. Disponível em: arXiv preprint cond-mat/9904034. Acesso em: 16 set. 22.

PG160

Predição de interações fármaco-alvo com Biclustering Random Forests

ILIDIO, Pedro; ALVES, André Hallwas Ribeiro; THIEMANN, Otavio; CERRI, Ricardo

ilidio@alumni.usp.br

Diversos processos naturais e sociais se manifestam sob a forma de redes bipartidas, em que dois grupos de instâncias apresentam conexões apenas entre si, sem conexões internas a cada um. Exemplos de problemas passíveis de serem apresentados nesse formato incluem as mais diversas formas de interação entre dois tipos distintos de entidades, como interações fármaco-proteína, microRNA-mRNA, ou mesmo itens e usuários em um serviço de compras *on-line*. No domínio biológico, despertam grande interesse os processos de descoberta e reposicionamento de fármacos, em que novas interações entre moléculas pequenas e alvos no organismo (como proteínas receptoras) são determinadas. Contudo, a síntese dessas moléculas e os ensaios *in vitro* necessários para o aferimento de novas interações são de elevado custo, de maneira que novas metodologias *in silico* têm, cada vez mais, ganhado espaço na pesquisa científica. Dentre elas, abordagens de aprendizado de máquina (AM) têm se mostrado especialmente atrativas, com a grande vantagem de não necessitarem de simulações físicas computacionalmente custosas ou da resolução de estruturas proteicas, como o *docking* molecular. Entretanto, a grande quantidade de interações possíveis, bem como validação experimental frequentemente escassa e só capaz de confirmar interações positivas, dificultam enormemente sua aplicação. Além disso, alguns dos modelos mais profícuos do campo, que fazem uso de aprendizado profundo, são naturalmente incapazes de explicar as decisões tomadas, de forma que sua capacidade de resolver o problema de predição dificilmente se traduz em conhecimento sobre a tarefa, conhecimento esse que, disponível à humanidade, fomentaria o desenvolvimento metodológico inclusive fora do escopo do AM. Nesse contexto, trabalhos anteriores (1-2) provêm uma adaptação simples de métodos baseados em árvores de decisão, notadamente transparentes, para dados de interação, permitindo com que todas as interações candidatas possam ser consideradas em tempo plausível de construção do modelo. O presente trabalho estende essa linha de pesquisa ao introduzir otimizações e novas formas de ensemble, reimplementando as árvores adaptadas de forma eficiente e compatível com bibliotecas atuais, bem como apresentando as Biclustering Random Forests, versão do célebre algoritmo de Breiman (3) otimizada a dados bipartidos. Explora-se também a regularização do modelo com informações de vizinhança, buscando mitigar de forma inovadora o problema da esparsidade da matriz de adjacência ao introduzir influência de critérios não-supervisionados durante o crescimento das árvores em si, com mínima necessidade de pré-processamento dos dados. Nota-se que o teste e validação computacional dos modelos de AM no contexto de interações fármaco-alvo positivas-desconhecidas são frequentemente realizados de forma questionável, reportando pontuações incongruentes com a complexidade do problema em questão. São então providas e demonstradas ferramentas para auxiliar nesse processo, reavaliando e comparando métodos anteriores sob ótica mais criteriosa. Por fim, são obtidos resultados competitivos com os modelos estado-da-arte em quatro *datasets* padrão-ouro de *benchmarking*, e espera-se que as ferramentas aqui disponibilizadas possam facilitar o desenvolvimento de novas técnicas de predição de interações num futuro próximo.

Palavras-chave: Interações fármaco-alvo. Árvores de decisão semi-supervisionadas. Random Forests.

Agência de fomento: CAPES (88887.529627/2020-00; 88887.641930/2021-00; 88887.684441/2022-00)

Referências:

1. PLIAKOS, K.; GEURTS, P.; VENS, C. Global multi-output decision trees for interaction prediction. **Machine Learning**, v. 107, n. 8, p. 1257–1281, May 2018. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10994-018-5700-x>. Acesso em: 9 set. 2022.
2. PLIAKOS, K.; VENS, C. Drug-target interaction prediction with tree-ensemble learning and output space reconstruction. **BMC Bioinformatics**, v. 21, n. 1, p. 1–11, 7 Feb.. 2020. Disponível em: <https://bmcbioinformatics.biomedcentral.com/articles/10.1186/s12859-020-3379-z>. Acesso em: 9 set. 2022.
3. BREIMAN, L. Random forests. **Machine Learning**, v. 45, n. 1, p. 5-32, 2001. Disponível em: <https://link.springer.com/content/pdf/10.1023/A:1010933404324.pdf>. Acesso em: 9 set. 2022.

PG161

Investigação da resposta imunológica in vitro em câncer de pele melanoma após combinação de Radioterapia e Terapia Fotodinâmica

LOPES, Raphael Guimaraes; FARIA, Clara; MEDEIROS, Alexandra Ivo de; BAGNATO, Vanderlei Salvador; INADA, Natalia

raphaelguimalopes@usp.br

O melanoma é um câncer que se desenvolve nos melanócitos localizados na pele, na íris e na retina do olho, no epitélio da mucosa da boca e em outros locais do corpo, sendo o melanoma cutâneo um dos cânceres de pele mais temidos em todo o mundo. (1) Dependendo das características do tumor, as opções terapêuticas podem ser ressecção cirúrgica, quimioterapia, radioterapia e imunoterapia (2). A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma modalidade terapêutica onde uma molécula fotossensível (FS), é excitada por irradiação em um comprimento de onda específico e na presença de oxigênio geram espécies reativas de oxigênio (EROs) ou radicais livres, que reagem com o microambiente local do tumor, causando a morte celular. (2) Estudos mostraram que a TFD sozinha tem eficácia limitada em melanomas, devido a mecanismos de proteção, como pigmentação e resistência ao estresse oxidativo. (2) Diante dessas circunstâncias, a terapia fotodinâmica, pensada em conjunto com outras terapias, como a radioterapia e a imunoterapia, podem não apenas matar os tumores primários diretamente, como induzir a morte celular imunogênica pela ativação de uma resposta imune antitumoral eficaz. (3) Nesta pesquisa estamos investigando a resposta imunológica in vitro em células de tumor de pele do tipo melanoma murino (B16F10) após tratamento combinado de TFD e radioterapia. Com base em ensaios já realizados neste trabalho, foi determinado para a combinação das terapias, a fotoditazina (PDZ) como o FS para TFD com fluências de 2 J/cm^2 e concentração de $5 \text{ } \mu\text{g/ml}$ e dose de radiação ionizante de 4 Gy para radioterapia. No momento, intervalos entre a aplicação das terapias de 1, 4, 12, 24 e 48 horas estão sendo testados utilizando os parâmetros mencionados acima. Resultados preliminares demonstraram um aumento na morte celular provocada pela combinação das terapias nos grupos com intervalo de 24 e 48 horas quando comparados com os grupos de intervalo inferior a 12 horas. Os próximos passos serão investigar o tipo de morte celular e a resposta imune desses grupos experimentais, avaliando se combinações dessas duas terapias é promissora para o tratamento do melanoma.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Radioterapia. Clorina. Melanoma.

Agência de fomento: CAPES (88887.684735/2022-00)

Referências:

- 1 CHANG, A. E.; KARNELL, L. H.; MENCK, H. R. The National Cancer Data Base report on cutaneous and noncutaneous melanoma: a summary of 84,836 cases from the past decade. **Cancer** : Interdisciplinary International Journal of the American Cancer Society, v.83, n.8,p.1664-1678,1998.
- 2 HUANG, Y.Y. *et.al.* Melanoma resistance to photodynamic therapy: new insights. **Biological**

Chemistry v.394,n.2,p.239-250,2013.

3 DUAN, X.; CHAN, C.; LIN, W. Nanoparticle-mediated immunogenic cell death enables and potentiates cancer immunotherapy. **Angewandte Chemie**, v. 58,n.3, p. 670–680, Jan. 2019.

PG162

Estudo de novas técnicas experimentais para discriminação de diferentes efeitos ópticos não lineares

MOYSES, Renato Mafra; MISOGUTI, Lino

renatomaframoyes@usp.br

Frequentemente, efeitos não lineares refrativos distintos atuam simultaneamente durante as interações ópticas não lineares entre a luz e a matéria, resultando em uma resposta não linear efetiva única. Por exemplo, efeitos não lineares podem depender da duração do pulso, do comprimento de onda, da taxa de repetição e da energia do feixe laser e, também, das absorções linear e não linear da amostra. Portanto, para que sejam realizadas medidas corretas de não linearidades ópticas, é crucial saber se há existência de mistura de efeitos não lineares e como discriminá-la. Por simplicidade, consideram-se apenas três diferentes e mais importantes efeitos refrativos não lineares: eletrônico puro, orientacional e térmico. Do ponto de vista de caracterização de materiais é fundamental saber quais efeitos estão contribuindo para um determinado sinal não linear. Por exemplo, diferentes efeitos ópticos não lineares podem ter tempos de resposta diferentes e assim podem ser discriminados pela resposta temporal. (1) Neste caso, normalmente utilizam-se de técnicas com dois ou mais feixes lasers, métodos tais que funcionam porque o efeito não linear eletrônico puro é quase instantâneo enquanto o de orientação molecular e o térmico, são lentos. Porém, técnicas experimentais que usam dois ou mais feixes laser possuem maior complexidade do que as de feixe único. Logo, neste projeto, propõe-se utilizar métodos de feixe único para medir e discriminar efeitos não lineares, explorando a polarização da luz. São abordadas duas técnicas de medidas, a de Rotação Não Linear da Polarização Elíptica (RNLPE) e a de Varredura-Z Resolvida em Polarização (VZRP). Enquanto o sinal da RNLPE é "cego" para efeitos térmicos, o da VZRP muda distintamente conforme se muda a polarização da luz: linear e circular, dependendo da origem da não linearidade. Já foi demonstrado que medidas da refração não linear, utilizando a RNLPE, em função da duração do pulso, permitem distinguir a contribuição dos efeitos eletrônico e orientacional. (2) Além disso, mais recentemente, foram feitas medidas de VZRP nas quais é possível discriminar dois efeitos de origem diferentes. (3) O enfoque do projeto, então, será a extensão da técnica de VZRP, adicionando como parâmetro a variação da taxa de repetição do feixe laser, juntamente com a da polarização, resultando em medidas de varredura única que podem determinar simultaneamente as contribuições dos três efeitos não lineares considerados. Para isso, utilizou-se puramente do Dissulfeto de Carbono (CS₂) como primeira amostra, um solvente com valores expressivos para refração não linear no regime estudado, e adicionou-se o corante Disperse Red 13 (DR13) na solução de CS₂ (segunda amostra) para induzir um maior efeito térmico e estudar como variava o sinal não linear. Por fim, as medidas de VZRP para as amostras estudadas possibilitam a construção de um gráfico com comportamento linear da amplitude do sinal de varredura-Z em função da taxa de repetição do laser, que, a partir de sua análise (coeficientes angular e linear), fornece o valor de cada um dos três efeitos não lineares refrativos.

Palavras-chave: Óptica-não-linear. Pulsos-ultracurtos. Efeitos refrativos.

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

Referências:

- 1 REICHERT, M. *et al.* Temporal, spectral, and polarization dependence of the nonlinear optical response of carbon disulfide. **Optica**, v. 1, n. 6, p. 436-445, 2014.
- 2 MIGUEZ, M. L. *et al.* Measurement of third-order nonlinearities in selected solvents as a function of the pulse width. **Optics Express**, v. 25, n. 4, p. 3553-3565, 2017.
- 3 MELHADO, M. S. *et al.* Discrimination between two distinct nonlinear effects by polarization-resolved Z-scan measurements. **Optics Express**, v. 28, p. 3352-3360, 2020. DOI: 10.1364/OE.378270.

PG163

Experimentos *in vitro* utilizando *phantom* para investigação do comportamento do ultrassom na terapia sonodinâmica

GONCALVES, Isabella; ALVES, Fernanda; PRATAVIEIRA, Sebastião; BAGNATO, Vanderlei Salvador

isabellasalgado002@gmail.com

A terapia sonodinâmica (SDT) é uma nova abordagem terapêutica promissora, derivada da terapia fotodinâmica (PDT), que vêm apresentando excelentes resultados na redução de tumores e na inativação de microrganismos. (1-2) Esta terapia envolve tanto a interação de ondas ultrassônicas com um agente sensibilizante sonoativo, como os efeitos mecânicos gerados pela cavitação do meio por onde o ultrassom se propaga. A combinação destes eventos leva à formação de espécies reativas de oxigênio (EROs) e à ocorrência de danos físicos nas membranas de células tumorais ou de microrganismos patogênicos, bem como a desestruturação de seus biofilmes. (3) Por ser uma técnica relativamente nova, a literatura referente à SDT ainda é escassa e os melhores parâmetros e formas de aplicação não estão totalmente definidos. Portanto, este trabalho tem como objetivo fornecer informações que auxiliarão na construção do conhecimento a respeito da SDT, permitindo a delimitação dos parâmetros e formas de aplicação mais adequadas e levando à determinação de protocolos de tratamento eficientes e seguros. Assim, o comportamento do ultrassom está sendo investigado em experimentos *in vitro* que analisam a atividade da SDT mediada por curcúmina contra *Staphylococcus aureus*. Para isso, suspensões bacterianas padronizadas a 10^8 células/mililitro recebem o tratamento com a SDT em diferentes parâmetros: frequência de 1 MHz, intensidades de 1 a 3 W/cm², ciclos de trabalho de 20 e 50%, diferentes distâncias entre o transdutor e a amostra, além de avaliar o meio acoplador (água e *phantom* acústico de gelatina). Após os tratamentos, as bactérias foram recuperadas e o teste de viabilidade celular (unidades formadoras de colônia por mililitro - UFC/mL) foi executado. Foi possível observar uma redução total do crescimento de *S. aureus* quando aplicada uma intensidade de 3 W/cm², ciclo de trabalho de 50% e frequência de 1 MHz, a uma distância de 2 cm utilizando-se o *phantom* como espaçador. Quando os tratamentos foram realizados com intensidade de 1 W/cm², nas mesmas condições, não houve redução do crescimento bacteriano. Serão testados outros valores de intensidade e ciclos de trabalho, diferentes distâncias e formas de aplicação, até que sejam obtidas informações suficientes para a elaboração de protocolos que aumentem a eficiência e a segurança da SDT, permitindo o sucesso e a expansão de suas aplicações.

Palavras-chave: Ultrassom. Terapia sonodinâmica.**Agência de fomento:** CAPES (88887.663608/2022-00)**Referências:**

1 CHOI, V.; RAJORA, M. A.; ZHENG, G. Activating drugs with sound: mechanisms behind sonodynamic therapy and the role of nanomedicine. **Bioconjugate Chemistry**, v. 31, n. 4, p. 967–989, 2020. DOI: 10.1021/acs.bioconjchem.0c00029.

2 FAN, L. *et al.* Sonodynamic antimicrobial chemotherapy: an emerging alternative strategy for microbial

inactivation. **Ultrasonics Sonochemistry**, v. 75, 2021. DOI: 10.1016/j.ultsonch.2021.105591.

3 ROY, J. *et al.* Antibacterial sonodynamic therapy: current status and future perspectives. **Biomaterials Science and Engineering**, v. 7, n. 12, p. 5326-5338, 2021. DOI: 10.1021/acsbiomaterials.1c00587.

PG164

Estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido a quebra da invariância de Lorentz

CASTILHO, Rafael Rodrigues; HUERTA, Humberto Martinez

rafael.rodrigues.castilho@usp.br

Observatórios modernos nos permitiram avanços no estudo da astrofísica de partículas, devido a suas grandes precisões nas medidas e a possibilidade de estudar um grande número de fontes e de eventos. Graças a tais avanços hoje é possível utilizar a astrofísica de partículas para testar física fundamental e seus limites de validade. Alguns estudos recentes dedicados a procura de teorias unificadoras, como por exemplo teorias quânticas da gravidades, são compatíveis com a quebra da invariância de Lorentz (LV), embora os sinais de LV são esperados para serem pequenos e ocorrem em altas energias, nós podemos utilizar da astrofísica de partículas para determinar limites de validade dado as altíssimas energias e grandes distâncias envolvidas. Em nosso projeto realizamos um estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido a quebra da invariância de Lorentz (LIV) (1), nós primeiramente fizemos um estudo teórico do Modelo Padrão Estendido (2) a fim de compreender como a quebra de invariância de Lorentz pode surgir na teoria, nós deduzimos a relação de dispersão modificada, que neste regime implica que fótons com altas energias possuem velocidades diferentes devido a modificações na sua relação de dispersão e assim fótons emitidos simultaneamente em uma fonte astrofísica devem chegar à Terra em tempos diferentes, nós deduzimos a função que descreve esta diferença no tempo considerando efeitos cosmológicos. Em seguida, nós fizemos um estudo das fontes utilizadas neste trabalho, os Gamma Ray Bursts (GRBs) (3), a fim entender seu comportamento e propriedades físicas, como seus diferentes tipos e mecanismos de emissão. Depois nós propomos um novo reescalonamento dos dados experimentais para que seja possível fazer uma análise estatística utilizando múltiplas fontes simultaneamente. Posteriormente nós selecionamos e coletamos um conjunto que contém 57 Fótons de 14 GRBs, é um conjunto selecionado por nós que consiste em todos os fótons detectados pelo Telescópio Espacial Fermi de Raios Gamma entre os anos de 2008 e 2020 e cuja energia emitida é maior que 10 GeV e que foram detectados dentro de um intervalo de tempo, que depende do Redshift, após o trigger, a procura pelos GRBs com Redshift conhecido foi feita usando a base de dados do Icecube, com os GRBs em mãos usamos a base de dados do FERMI para obter os parâmetros observacionais dos Fótons individuais. Depois nós fizemos uma análise estatística a fim de constatar se a compatibilidade com o modelo de LIV. Em seguida, nós propomos, baseados nas propriedades do GRBs, um conjunto de funções com objetivo de modelar a diferença no tempo de chegada como atrasos intrínsecos na fonte, não simultaneidade na emissão, e com isto, determinar se há ou não compatibilidade com o modelo de LIV.

Palavras-chave: Astrofísica. Gamma ray Burst.

Agência de fomento: CAPES (88887.371665/2019-00)

Referências:

- 1 AMELINO-CAMELIA, G. *et al.* In-vacuo-dispersion features for GRB neutrinos and photons. **Nature Astronomy**, v. 1, p. 0139, 2017. DOI: 10.1038/s41550-017-0139.
- 2 COLLADAY, D.; KOSTELECKÝ, V. A. Lorentz-violating extension of the standard model. **Physical Review D**, v. 58, n. 11, p. 116002, 1998.
- 3 AJELLO, M. *et al.* A decade of gamma-ray bursts observed by fermi-LAT: the second GRB catalog. **Astrophysical Journal**, v. 878, n. 1, p. 52, June 2019.

PG165

Detecção de plantas espontâneas utilizando aprendizado profundo em imagens multiespectrais

MARINHO, Filipe Antunes; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de

filipemarinho@usp.br

O Brasil é atualmente o maior exportador de soja do mundo, porém também é um dos maiores consumidores de agrotóxicos. A aplicação indiscriminada desses defensivos, principalmente como herbicidas, tem profundos impactos ambientais e econômicos. (1) Com os avanços da área de Inteligência Artificial, métodos baseados na aplicação localizada nas plantas espontâneas estão sendo desenvolvidos. O que em condições ideais pode levar a uma redução de até 88% no uso dos defensivos. (2) Entretanto, a alta diversidade genética e a similaridade com as plantas da lavoura apresenta grandes desafios às técnicas tradicionais de imageamento, que utilizam apenas três canais de cores do espectro visível em faixas do vermelho, verde e azul. Esse trabalho busca desenvolver um protótipo de baixo custo que utilize a informação de diversas faixas espectrais para aplicação seletiva de herbicidas em lavouras de soja. Analisando a importância das bandas espectrais e a melhor combinação nos modelos gerados. Foi construído um protótipo de câmera multiespectral utilizando filtros passa-banda e câmeras monocromáticas para a coleta de um banco de imagens de diferentes espécies de plantas. O algoritmo de detecção de objetos em tempo real YOLO foi adaptado para utilização das imagens multicanais. Diferentes técnicas de alinhamento e fusão da informação dos canais espectrais na rede neural foram avaliados. Os modelos treinados foram capazes de atuar em tempo real e generalizar a detecção para diferentes estágios vegetativos. As bandas espectrais do infravermelho próximo e do verde apresentaram melhor desempenho individual comparados aos demais. Os resultados obtidos investigam a utilização das informações de cor em redes neurais convolucionais e demonstram a viabilidade do sistema ótimo obtido. A capacidade de diferenciação das espécies de plantas também pode possibilitar a utilização de defensivos específicos, o que minimiza o aparecimento de espécies resistentes e aumenta a eficiência.

Palavras-chave: Inteligência artificial. Imagens multiespectrais. Agricultura de precisão.

Agência de fomento: CAPES (88887.637020/2021-00)

Referências:

- 1 LIMA, I. B.; BOËCHAT, I. G.; GÜCKER, B.. Glifosato no Brasil. **Caderno de Geografia**, v. 31, n. 1, p. 90-90, 2021.
- 2 AHMAD, A. *et al.* Performance of deep learning models for classifying and detecting common weeds in corn and soybean production systems. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 184, p. 106081, 2021.

PG166

Reposicionamento farmacêutico por meio do desenvolvimento de novas formas sólidas para o tratamento de Covid-19

NUNES, Paulo; SANTIAGO, Pedro Henrique de Oliveira; ELLENA, Javier Alcides

paulo.ns@usp.br

Um dos fatores relevantes para o processo clássico de desenvolvimento de terapias para o combate a doenças é o tempo necessário para avaliar compostos candidatos, até que se tornem viáveis e possam ser testados quanto a sua segurança e dosagem necessária em humanos. Esse processo progride de forma lenta podendo ultrapassar até mesmo 10 anos e pode custar alguns milhões de dólares. Devido a rápida propagação do vírus SARS-CoV-2 desde o ano 2020 em nível mundial, o mundo experimentou o estado de pandemia, situação em que se faz necessária uma rápida ação para desenvolver uma estratégia de combate e evitar o agravamento do cenário. Neste contexto podemos utilizar uma alternativa que diminui os riscos e o tempo necessário para desenvolver um tratamento melhorando de forma simultânea propriedades físico-químicas e farmacocinéticas, combinando as técnicas de engenharia de cristais e reposicionamento farmacêutico que visa identificar e desenvolver novas aplicações para medicamentos já existentes. (1) Considerando os fármacos candidatos a reposicionamento para o tratamento da infecção pelo SARS-CoV-2 destaca-se o Aciclovir, fármaco antiviral derivado de guanina e de grande disponibilidade, utilizado como agente quimioterápico no tratamento de infecções ocasionadas pela família do vírus herpes, tais como Herpes simplex (tipos 1 e 2) e Varicela zoster, que tem apresentado ótimos resultados tanto em testes in silico quanto em humanos. (2) A partir da técnica de engenharia de cristais, foram desenvolvidas novas formas sólidas derivadas do Aciclovir, as quais estão sendo avaliadas por técnicas de caracterização em estado sólido para uma melhor compreensão de suas propriedades físico-químicas. Neste trabalho temos a descrição de um sal de Aciclovir desenvolvido com o objetivo de aprimorar solubilidade aquosa e permeabilidade celular do fármaco, classificado no Sistema de Classificação Biofarmacêutica (SBC) como Classe III ou IV.

Palavras-chave: Reposicionamento farmacêutico. Engenharia de cristais. Covid-19.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ASHBURN, T.; THOR, K. Drug repositioning: identifying and developing new uses for existing drugs. **Nature Review Drug Discovery**, v. 3, p. 673-683, 2004. DOI: 10.1038/nrd1468.
- 2 BAKER, V. S. Acyclovir for SARS-CoV-2: an old drug with a new purpose. **Clinical Practice**, v. 18, n. 1, p. 1584-1592, 2021.

PG167

Prospecção da interface de interação no processo de polimerização da enzima glutaminase C.

ABREU, Flavia Mayumi Odahara de; AMBROSIO, Andre; TANIMOTO, Camila; DIAS, Sandra M. G.

flavia.abreu@usp.br

As vias glicolítica e glutaminolítica se apresentam alteradas no câncer a fim de atender às demandas energéticas e biossintéticas crescentes. A glutamina é um dos nutrientes essenciais para o metabolismo tumoral, sendo convertida em glutamato pelas enzimas glutaminases, codificadas em mamíferos por dois genes distintos, GLS e GLS2. Dentre as isoformas existentes, a glutaminase C (GAC) é crucial, encontrando-se em abundância em diferentes linhagens tumorais. (1) Organizando-se em diferentes estruturas, pode apresentar variações quanto à sua eficiência, sendo o tipo mais ativo caracterizado pela formação de filamentos helicoidais, através do empilhamento lateral dos tetrâmeros da proteína, na presença de fosfato inorgânico (fGAC).(2) No entanto, o mecanismo molecular pelo qual ocorrem a oligomerização e o aumento de atividade da GAC ainda é elusivo; diante desse cenário, este trabalho visa confirmar o modelo proposto previamente por nosso grupo através de estudos estruturais e bioquímicos da proteína selvagem ou modificada em pontos importantes para a polimerização. Para isso, foram planejadas mutações sítio-dirigidas em resíduos localizados nas regiões de interface e do loop de ativação. A GAC selvagem e seus mutantes foram expressos em larga escala de forma heteróloga, em fração solúvel e purificada em três etapas – por cromatografia de afinidade a cobalto, troca iônica (IEC) e cromatografia de exclusão molecular (SEC) –, com confirmação por SDS-PAGE. Por meio de análises de espalhamento de luz dinâmico (DLS), foi possível observar uma mudança da forma tetramérica para oligomérica da proteína selvagem de acordo com a presença de fosfato inorgânico (Pi), enquanto os mutantes mantiveram-se no estado inicial sob as mesmas condições. A eficiência enzimática foi confirmada por ensaios de cinética indiretos baseados em uma reação acoplada, medindo, pela absorção de luz de comprimento de onda 340 nm, a presença de NADH formado durante a conversão do glutamato em α -cetoglutarato pela enzima glutamato desidrogenase (GDH). A análise mostrou que os mutantes também apresentam eficiência reduzida em contraste com a proteína selvagem mesmo na presença de fosfato, com atividade similar à que ocorre na sua ausência. Assim, os dados sugerem que as mutações que impedem a filamentação também são responsáveis por inativar a proteína, confirmando que os resíduos substituídos são críticos para a formação, estabilização e função da fGAC. A compreensão sobre esse mecanismo pode estabelecer a enzima Glutaminase C como um alvo molecular promissor para o desenvolvimento de novas terapias antitumorais.

Palavras-chave: Glutamina. Glutaminase. Enzimas.

Agência de fomento: CAPES (88887.474257/2020-00)

Referências:

1 CASSAGO, A. *et al.* Mitochondrial localization and structure-based phosphate activation mechanism of Glutaminase C with implications for cancer metabolism. **Proceedings of the National Academy**

of Sciences of the United States of America ,v. 109, n. 4, p. 1092–1097, 2012.

2 FERREIRA, A. P. S. *et al.* Active glutaminase C self-assembles into a supratetrameric oligomer that can be disrupted by an allosteric inhibitor. **Journal of Biological Chemistry** ,v. 288, n. 39, p. 28009–28020, 2013.

PG168

Algoritmos quânticos variacionais

DRINKO, Alexandre; PINTO, Diogo de Oliveira Soares

adrinko@usp.br

Os algoritmos quânticos variacionais (VQA) têm se apresentado como uma forma de obter vantagem quântica nos chamados dispositivos/computadores NISQ (*Noisy Intermediate Scale Quantum*), que trabalham em um regime misto de sistema clássico e quântico. (1) O processo do VQA consiste em codificar a solução de um dado problema em uma quantidade chamada função custo, a qual ao ser minimizada, fornece a solução do problema em estudo. (2) Para que o processo do VQA possa ocorrer, fornecemos um dado estado quântico parametrizado por alguma quantidade, o qual é submetido ao chamado *Ansatz*, que é o processo quântico utilizado para o tratamento do estado de entrada. Em seguida calcula-se a função custo e caso o resultado esteja fora da margem de aceitação do estado desejado, os parâmetros iniciais são enviados para um processo de otimização clássico, que realiza uma nova iteração utilizando o estado inicial atualizado com os novos parâmetros obtidos na otimização. Este procedimento é repetido até que a função custo seja minimizada. Como a solução é avaliada por meio da função custo, esta deve ser confiável para fornecer o resultado esperado e que ela possa ser otimizável por algum algoritmo clássico. Como exemplo podemos utilizar a construção de estados de Gibbs (3), em que escolhemos a função custo como a energia livre de Helmholtz do sistema. Esta escolha é natural uma vez que uma das características do estado de Gibbs é possuir este mínimo da energia livre. Ao definir a função custo como a energia, o interesse passa a determinar qual o seu valor mínimo, ou seja, determinar o “*ground state*” (estado de mínima energia) do sistema, em que podemos destacar a obtenção do estado fundamental de moléculas e definir limites inferiores de energia para um dado sistema. Os VQA's têm de destacado nos últimos anos devido a sua ampla gama de aplicação em química, física, matemática e computação, entretanto, ainda possui pontos a serem estudados no âmbito de compreender sua eficácia, limitações e quais fatores que podem influenciar sua funcionalidade.

Palavras-chave: VQA. Função-custo. Otimização.

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

Referências:

- 1 CERZO, M. *et al.* Variational quantum algorithms. **Nature Reviews Physics**, v. 3, n. 9, p. 625-644, 2021.
- 2 MAJUMDER, A.; LEWIS, D.; BOSE, S. **Variational quantum circuits for multi-qubit gate automata**. 2022. arXiv preprint arXiv: 2209.00139.
- 3 WANG, Y.; LI, G.; WANG, X. Variational quantum Gibbs state preparation with a truncated Taylor series. **Physical Review Applied**, v. 16, n. 5, p. 054035, 2021.

PG169

Seleção de bactérias isoladas de um reservatório brasileiro para a produção de biossurfactante: análises da tensão superficial, tensão interfacial e quantificação de proteínas totais do biossurfactante semipurificado

FERREIRA, Jakeline Freitas; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini

jakeline.ferreira@usp.br

Biossurfactantes (BS) são compostos de origem microbiana que exibem propriedades surfactantes distribuindo-se em interfaces óleo/água capazes de diminuir as tensões superficiais e interfaciais. Os BS apresentam potencial de aplicação em vários setores, pois são biodegradáveis, exibem baixa toxicidade e muitos têm atividade a condições extremas de temperatura, pH e salinidades. (1) No setor da indústria petrolífera, esse tipo de composto pode ser utilizado em processos de recuperação terciária do petróleo (MEOR). O tipo e a quantidade de BS produzido são influenciados por diferentes fontes de carbono (C) e nitrogênio (N) e pela proporção C/N, além das condições de cultivo. (2) O presente trabalho buscou avaliar as frações do biossurfactante semipurificado produzido pelas fontes de carbono e nitrogênio (sacarose e ureia), previamente selecionadas, tendo vista otimizar as condições de produção de BS por uma linhagem bacteriana identificada como *Bacillus alveayuensis* (Ar35D5), para fim de aplicação em MEOR. *Bacillus alveayuensis* foi cultivada em Meio Mineral, na relação (C/N: 2/1) utilizando as fontes sacarose e ureia, à temperatura de 55°C, durante 144 horas, após este período as células bacterianas foram removidas por centrifugação (10000 g \times por 40 min, 15°C). O sobrenadante livre de células foi precipitado pela adição de HCl (5N) a um pH final de 2,0 e armazenado overnight a 4°C. Os precipitados foram recolhidos por centrifugação a 10 000 g durante 40 min a 4°C, reajustado o pH para 7,0 e secos em liofilizador, este denominado BS-Bruto. Essa amostra de BS-Bruto passou por um processo de extração com clorofórmio em funil de separação e foi submetida à secagem em capela de exaustão. Este produto extraído, denominado BS-Extraído, foi purificado parcialmente em coluna de vidro contendo sílica gel. Para isso, amostras de 0,10 g de BS-Extraído foram dissolvidas em 100 mL de água ultrapurificada e adicionadas em coluna empacotada (25 \times 3,0 cm) com sílica gel 60. Os solventes utilizados foram água ultrapurificada, acetonitrila 25%, 45%, 60%, 75% e 100%, aplicando-se 450 mL de cada. Todas as frações obtidas de acetonitrila foram secas em liofilizador e foram denominadas BS-Semipurificado. As frações secas do BS-Semipurificado (25%, 45%, 60%, 75%) foram submetidas a medidas da tensão superficial (TS) e interfacial (TI) utilizando o tensiômetro automático (modelo Sigma 700, marca Attension). A análise do conteúdo proteico foi realizada para as amostras BS-Semipurificado 60% e BS-Semipurificado 75% utilizando o kit comercial Pierce® BCA Protein Assay Kit (Thermo Fisher Scientific), de acordo com o protocolo do fabricante em microplaca de 96 poços, com posterior medida de absorbância em 562 nm. Os resultados revelaram que o BS-Semipurificado 60% apresentou uma maior diminuição da tensão superficial $39,75 \pm 0,29 \text{ mN.m}^{-1}$ e melhor redução da tensão interfacial $10,63 \pm 0,25 \text{ mN.m}^{-1}$. Além disso, para a análise da quantificação de proteínas totais o BS-Semipurificado 60% apresentou maiores valores de absorbância 0,264 ($\pm 0,007$) referindo a 6,7% da quantificação de proteínas totais, sendo o coeficiente de determinação ($R^2 = 0,986$). Dessa forma, concluímos que a fração de BS-Semipurificado 60% apresenta a maior concentração de biossurfactante

mostrando-se promissor para o uso em MEOR.

Palavras-chave: Biossurfactante. Bacillus. MEOR.

Agência de fomento: CNPq (142282/2017-0)

Referências:

- 1 NITSCHKE, M.; PASTORE, G.M. Production and properties of a surfactant obtained from *Bacillus subtilis* grown on cassava wastewater. **Bioresource Technology**, v. 97, n. 2, p. 336-341, 2006.
- 2 GEETHA S.J.; IBRAHIM M. B.; SANKET J. J. Biosurfactants: production and potential applications in microbial enhanced oil recovery (MEOR). **Biocatalysis and Agricultural Biotechnology**, v. 14, p. 23-32, 2018.

PG170

Estudo da combinação de Terapia por Fotobiomodulação e Radioterapia na vascularização

COSTA, Camilla; FARIA, Clara; PATINO, Claudia Patricia Barreira; SOUZA, Giancarlo; BAGNATO, Vanderlei Salvador

camilla.santos.costa@usp.br

O trabalho visa investigar os efeitos da combinação de Radioterapia (RT) e Terapia por Fotobiomodulação (PBMT) na vascularização tumoral. A eficiência da RT depende, entre outros fatores, da concentração de oxigênio. Assim, tecidos hipóxicos tendem a ser mais resistentes ao RT e, portanto, a vascularização tecidual é um parâmetro crucial para o resultado do tratamento. A Terapia por Fotobiomodulação tem como princípio a interação da luz com fotorreceptores celulares, com o intuito de modular a atividade celular, sendo um de seus benefícios justamente a redução da inflamação e aumento da vascularização tecidual, efeitos estes que podem contribuir para a radiosensibilização do tumor, como observado em trabalhos anteriores. (1-3) Para investigar possíveis alterações vasculares causadas pela PBMT e pela combinação PBMT-RT, foram realizados experimentos *in vitro*, com a linhagem endotelial humana EA.hy926 (ATCC CRL-2922™). Foram propostos dois protocolos: o de uma única sessão (PBMT: 5 J/cm² - 780 nm; RT: 5 Gy), e outro fracionado (PBMT: 5 J/cm² - 780 nm em 3 sessões; RT: 5 Gy em 3 sessões). A análise do efeito da terapia proposta na proliferação foi realizada pelo ensaio de MTT múltiplo. No protocolo de única sessão, os grupos RT e PBMT-RT apresentaram diferença estatística do controle a partir de 146 h, mas sem diferenças entre si. Já para o protocolo fracionado, os grupos RT e PBMT-RT se mostraram diferentes do controle para todos os tempos e diferentes entre si apenas em 98 h e 146 h. Em 98 h houve uma redução de 8% na proliferação do PBMT-RT em relação ao grupo RT e para 146 h, essa redução foi de 5%. Também foram realizados experimentos *in vivo* nos modelos de membrana corioalantóica de galinha (CAM) e xenoenxertos de carcinoma epidermóide (A431, ATCC CRL-1555™) em camundongos BALB/c nude. No modelo CAM, os ovos foram irradiados com RT e iluminados com PBMT no oitavo dia de desenvolvimento embrionário (EDD 8), com dose de PBMT de 5-15 J/cm² nos comprimentos de onda de 660 nm e 780 nm e de RT de 5 - 15 Gy. Em relação ao modelo de xenoenxerto de tumor A431 de camundongo, tumores de tamanho de 20 a 30 mm³ foram iluminados com PBMT (780 nm - 5 J/cm²) e irradiados com RT (5 Gy) em dias alternados, com três sessões de cada terapia. Para ambos modelos a progressão vascular foi monitorada por Tomografia de Coerência Óptica (OCT)-Speckle Variance e em camundongos, o crescimento tumoral também foi monitorado com paquímetro. Tanto no modelo CAM como no de tumores xenográficos não foi observada mudança significativa de densidade vascular em nenhum grupo experimental. Já em relação ao diâmetro, no nono dia de observação dos camundongos, houve um aumento de 60% no diâmetro no grupo RT e de 91% no grupo PBMT-RT, quando comparados ao grupo controle. Ainda serão realizadas análises de proliferação celular por marcação de BrdU e de hipóxia do tecido tumoral por técnica de imunohistoquímica.

Palavras-chave: Fotobiomodulação. Radioterapia. Vascular.

Agência de fomento: CNPq (160861/2021-7)

Referências:

- 1 FARIA, C. M. G. *et al.* Tumor radiosensitization by photobiomodulation. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: biology**, v. 225, p. 112349, 2021. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2021.112349.
- 2 DJAVID, G. E.; GOLIAIE, B.; NIKOOFAR, A. Analysis of radiomodulatory effect of low-level laser irradiation by clonogenic survival assay. **Photomedicine and Laser Surgery**, v.33, n. 9, p. 452–459, 2015. DOI: 10.1089/pho.2015.3893.
- 3 SILVA, C. R. *et al.* Photobiomodulation therapy combined with radiotherapy in the treatment of triple-negative breast cancer-bearing mice. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: biology**, v. 220, p.112215, 2021. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2021.112215

PG171

Unveiling the origin of UHECR: the role of local sources

DOURADO, Luciana Andrade; LANG, Rodrigo Guedes; SOUZA, Vitor de

lucianadourado@usp.br

Cosmic rays are charged relativistic particles of extraterrestrial origin. In particular, particles belonging to the highest energy end ($E > 10^{18}$ eV) of the energy spectrum of cosmic rays are commonly named ultra-high energy cosmic rays (UHECR). There are several open questions involving these fascinating particles. For instance, a mystery that remains in Astrophysics is the origin of UHECR. Due to interactions with the radiation and magnetic fields that permeate the Universe, the detection of these particles does not provide direct information about their original energy spectrum, distribution of arrival directions and abundance. UHECR energy losses via photopion production and photodisintegration cause a suppression in the energy spectrum, which highlight the relevant role that local sources play to describe the spectrum. (1) Furthermore, the flux of cosmic rays drops orders of magnitude with increasing energy, which results in a low statistic for the range in which UHECR belong to. While the aforementioned features make the study of UHECR quite challenging, it is possible to notice that there is plenty of space for important discoveries to come out. In the last years, the Pierre Auger Observatory, the largest cosmic ray detector ever built, has measured the first indications of anisotropy in the distribution of arrival directions of such particles, which has raised the expectation of solving this decades-long question in the upcoming years. (2) Therefore, the aim of this work is to further develop the understanding about the impact of astrophysical hypotheses in modeling the main anisotropy measurements used to search for the origin of UHECR. The goal is to calculate an upper limit on the density of sources without making too strong hypotheses by analyzing the dipole amplitude provided by the Pierre Auger Observatory. (3) It is worth mentioning that having such information about the sources is extremely important, since it can help us to eliminate a huge space of possibilities of existing models in highly energetic cosmic ray research.

Palavras-chave: Cosmic rays. UHECR. Local sources.

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

Referências:

- 1 LANG, R. G. *et al.* Revisiting the distance to the nearest UHECR source: effects of extra-galactic magnetic fields. **Physical Review D**, v. 102, n. 6, p. 063012, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevD.102.063012.
- 2 THE PIERRE AUGER COLLABORATION. Observation of a large-scale anisotropy in the arrival directions of cosmic rays above 8×10^{18} eV. **Science**, v. 357, n. 6537, p. 1266-1270, 2017. DOI: 10.1126/science.aan4338.
- 3 LANG, R. G. *et al.* Ultrahigh-energy cosmic rays dipole and beyond. **Physical Review D**, v. 103, n. 6, p. 063005, 2021. DOI: 10.1103/PhysRevD.103.063005.

PG172

Caracterização bioquímica de uma celobiose desidrogenase de *Thermothelomyces thermophilus* e sua aplicação como agente antimicrobiano

SAMANIEGO, Lorgio Victor Bautista; SOUSA, Andrei Nicoli Gebieluca Dabul Dias de; POLIKARPOV, Igor

lbautista@ifsc.usp.br

Nas últimas décadas, tem-se evidenciado um aumento nas infecções causadas por bactérias multirresistentes (1) e formadoras de biofilme (2) em paralelo com a redução do desenvolvimento de novos antibióticos. Em vista disso, são necessários novos tratamentos complementares, como proteínas e enzimas terapêuticas, que podem ajudar com esses problemas de saúde pública. No presente trabalho caracterizamos uma celobiose desidrogenase (CDH, EC 1.1.99.18) de *Thermothelomyces thermophilus* e a aplicamos como agente antimicrobiano. A análise bioquímica mostra que a CDH tem cofatores FAD e heme b ativos, pode oxidar vários substratos mono e oligossacarídicos (lactose, glicose, maltose, celo e xilo-oligossacarídeos) e produzir continuamente H₂O₂. Essas diversas funcionalidades podem ser explicadas por sua arquitetura tridimensional que foi predita com AlphaFold/ColabFold. Tal estrutura consiste em dois domínios proteicos (desidrogenase e citocromo) que fazem contato próximo, gerando um pocket enzimático de grande volume. Aplicando a CDH suplementada com celobiose sobre uma cultura planctônica de *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, houve mais de 50% de redução da viabilidade bacteriana, enquanto a aplicação de CDH sobre o biofilme da mesma linhagem reduziu de modo semelhante quantidade de biomassa em comparação com o controle de crescimento. Quando em sinergismo com gentamicina e cloranfenicol, a CDH propiciou a redução de 2 vezes a concentração mínima de erradicação do biofilme, tornando *S. aureus* ATCC 25923 mais sensível a esses antibióticos. O uso não canônico da CDH e outras enzimas na área da biomedicina vem crescendo (3), conforme documentado por estudos recentes, mas ainda estão em desenvolvimento. Em nosso estudo, a CDH é um candidato antimicrobiano atraente, devido à sua capacidade de produzir continuamente peróxido de hidrogênio a partir de açúcares como a celobiose, que não são metabolizados por patógenos.

Palavras-chave: Celobiose desidrogenase. Biofilme. Antimicrobiano.

Agência de fomento: CAPES (88887.612480/2021-00)

Referências:

- 1 HEDE, K. Antibiotic resistance: an infectious arms race. **Nature**, v. 509, p. S2–S3, Apr. 2014. DOI: 10.1038/509S2a.
- 2 LISTER, J. L.; HORSWILL, A.R. *Staphylococcus aureus* biofilms: recent developments in biofilm dispersal. **Frontiers in Cellular and Infection Microbiology**, v. 4, p. 178, Dec. 2014. DOI: 10.3389/fcimb.2014.00178.

3 THALLINGER, B. *et al.* Preventing microbial colonisation of catheters: antimicrobial and antibiofilm activities of cellobiose dehydrogenase. **International Journal of Antimicrobial Agents**, v. 44, n. 5, p. 402-408, Nov. 2014. DOI: 10.1016/j.ijantimicag.2014.06.016.

PG173

Redes de similaridade físico-química

REIS, Renan dos; COSTA, Luciano da Fontoura

renandosreiss@usp.br

A aplicabilidade de compostos químicos e biológicos na ciência e na indústria depende fortemente de suas propriedades físico-químicas. Por exemplo, características como estabilidade térmica ou massa molecular podem ser decisivas para que uma molécula possa ser produzida ou aplicada em processos industriais ou em tratamentos farmacêuticos. (1-2) Portanto, para auxiliar a triagem de compostos viáveis a aplicação tecnológica, torna-se interessante analisar como um grupo de moléculas, seja uma família de enzimas ou um grupo de ligantes terapêuticos, se desdobra em um espaço de características físico-químicas. Com esse objetivo, no presente trabalho, descrevemos como a metodologia de coincidência (3) pode ser empregada para construir redes de similaridade físico-química de compostos. A abordagem permite que sejam mapeados em nós de uma rede, e que as semelhanças físico-químicas de pares de compostos sejam representadas por ligações entre pares de nós. (3) A métrica de semelhança usada, o índice de coincidência (3), possui parâmetros que podem ser otimizados a fim de se obter uma estrutura de comunidades relevante para a aplicação das moléculas em estudo. Para exemplificar essa abordagem, analisamos um grupo de enzimas da família *Glycoside Hydrolase 13* (GH13) (1) e um grupo de moléculas pequenas do grupo ATC B, que possuem ação terapêutica no sangue e em órgãos hematopoiéticos. (2) As enzimas da família GH13 são ativas em carboidratos e possuem alto interesse biotecnológico. (1) Para otimização de redes de semelhança dessas enzimas, cada componente conectada das redes foi tratada como um cluster de enzimas, e os clusters produzidos foram otimizados para que melhor se ajustassem aos diferentes grupos de atividade catalítica da família GH13, resultando em uma rede cujos grupos de enzimas físico-quimicamente relacionados são altamente homogêneos. Já as redes das moléculas pequenas do grupo ATC B foram otimizadas para se obter alto grau de modularidade, resultando em poucos grupos cujas moléculas são altamente relacionadas entre si, facilitando a identificação de moléculas com perfis físico-químicos semelhantes. As redes de semelhança físico-química obtidas para ambos os casos permite avaliar subgrupos de compostos com propriedades desejáveis para diferentes aplicações, podendo ser aplicada para triagem de enzimas e ligantes.

Palavras-chave: Redes complexas. Biofísica. Biotecnologia.

Agência de fomento: CAPES (88887.637015/2021-00)

Referências:

- 1 MAAREL, M. J. E. C. *et al* .Properties and applications of starch-converting enzymes of the alpha-amylase family. **Journal of Biotechnology** ,v. 94, n. 2, p. 137–155, 2002.
- 2 MEANWELL, N. A. Improving drug candidates by design: a focus on physicochemical properties as a means of improving compound dis position and safety. **Chemical Research in Toxicology** ,v. 24, n. 9, p. 1420–1456, 2011.

3 COSTA, L. da F. Coincidence complex networks. **Journal of Physics: complexity**, v. 3, n. 1, p. 015012, 2022.

PG174

Avaliação da atividade oxigenase e peroxigenase de duas LPMOs de *Thermothelomyces thermophilus* na presença de diferentes agentes redutores

VACILOTTO, Milena Moreira; POLIKARPOV, Igor

milenamvacilotto@usp.br

Desde a descoberta do potencial das monooxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs, do inglês *Lytic Polysaccharide Monooxygenases*) em 2010, a degradação da biomassa lignocelulósica tem sido revolucionada. A clivagem oxidativa de polissacarídeos recalcitrantes, como a celulose e quitina, concomitante com a atividade sinérgica de LPMOs com glicosil hidrolases, impulsiona a despolimerização de biopolímeros, o que contribui para a atual eficiência de coquetéis celulolíticos comerciais amplamente utilizados a nível industrial para processamento de biomassa. (1) Inicialmente, acreditava-se que essas enzimas oxidativas utilizavam apenas oxigênio molecular como co-substrato, mas essa crença foi desafiada em 2016, quando foi demonstrado que também poderiam incorporar o oxigênio atômico do peróxido de hidrogênio nos produtos oxidados, resultando na clivagem do polissacarídeo. No entanto, esse tópico continua um tema de debate, dividindo autores em relação ao co-substrato natural dessas monooxigenases. (2) Essas enzimas dependentes de cobre apresentam regioseletividade, de forma que a hidroxilação do anel de açúcar pode ocorrer no carbono C1 ou C4, ou uma mistura de ambos, produzindo ácido adônico e 4-gemdiol, respectivamente. Ademais, LPMOs precisam de um doador de elétrons externo para completar seu ciclo catalítico, que na natureza podem ser obtidos através de pequenas moléculas redutoras, lignina, pigmentos fotossensíveis e outras proteínas (ex: celobiose desidrogenase (CDH)). (3) Nesse sentido, o projeto em questão se propõe avaliar a atividade oxigenase e peroxigenase de duas LPMOs pertencentes à família de atividade auxiliar 9 (AA9) de *Thermothelomyces thermophilus* (*Mt* LPMO9A e *Tt* LPMO9H) na presença de diferentes agentes redutores, incluindo moléculas contendo átomo de enxofre, benzenodiol, benzenotriol ou álcool benzílico, e outros compostos sem átomo de enxofre ou anel benzênico. Resultados utilizando celulose amorfa como substrato mostraram que a ativação de ambas as LPMOs é dependente do agente redutor escolhido, assim como do pH do meio, culminando em diferentes proporções de produtos oxidados em C1, C4 e C1/C4. Além disso, reações na presença de H₂O₂ se mostram mais rápidas que as na presença de O₂. Entretanto, o excesso de peróxido exógeno ou produzido através de reações entre os agentes redutores e o cobre ou a enzima ligada ao cobre, levou a uma diminuição da atividade das monooxigenases devido à danos oxidativos ao sítio ativo.

Palavras-chave: LPMO. Agentes redutores. H₂O₂.

Agência de fomento: CAPES (88887.601517/2021-00)

Referências:

1 CHYLENSKI, P. *et al.* Lytic polysaccharide monooxygenases in enzymatic processing of lignocellulosic biomass. **ACS Catalysis**, v. 9, n. 6, p. 4970-4991, Apr. 2019.

2 BISSARO, B. *et al.* Oxidative cleavage of polysaccharides by monocopper enzymes depends on H₂O₂. **Nature Chemical Biology**, v. 13, p. 1123–1128, Aug. 2017.

3 KRACHER, D. *et al.* Extracellular electron transfer systems fuel cellulose oxidative degradation. **Science**, v. 352, p. 1098-1101, Apr. 2016.

PG175

Studying the interaction of chitosans with different degrees of acetylation with lipid monolayers at physiological pH

JOCHELAVICIUS, Karen; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de

karen.jochelavicius@usp.br

Various events take place in a biological membrane, and different techniques can be used to study them. For instance, Langmuir monolayers is a membrane mimetic system that resembles half of a membrane – taken as a lipid bilayer. They are especially interesting for obtaining information at the molecular level, and are very useful to investigate interactions between membrane lipids and other biomolecules. (1) One of these molecules is chitosan, a natural polysaccharide obtained by the partial deacetylation of chitin. It displays many interesting properties, such as antimicrobial, anti-tumor, wound healing and fat binder. Because of its poor solubility in non-acidic pH, there is an effort to synthesize chitosans that keep their biological properties and are soluble at a broader pH range. In this work, we use two chitosans with different degrees of acetylation (35% and 15%, named Ch35% and Ch15%, respectively) that have a quasi-ideal random pattern of acetylation, full water solubility and unusually high weight average molecular weight, synthesized by Fiamingo *et al.* (2) Lipid monolayers with different compositions are used as bacteria and mammal membrane models, in order to investigate their interaction with these chitosans, at pHs 7.4 –more biologically relevant– and 4.5 –in the range of most of the scientific work. The lipids chosen were the zwitterionic dipalmitoyl phosphatidyl choline (DPPC) and dipalmitoyl phosphatidyl ethanolamine (DPPE); the anionic dipalmitoyl phosphatidyl glycerol (DPPG); the *Escherichia coli* total lipid extract and the lipopolysaccharide (LPS) from *E. coli* J5 (Rc strains). Ch35% or Ch15% were added to the subphases at concentrations of 0, 10^{-5} , 10^{-3} or 10^{-1} mg mL⁻¹. The later was only used in monolayers containing *E. coli* extract or LPS. In a published work (3), we already described the interaction of Ch35% with DPPC, DPP, DPPG and the *E. coli* extract. The presence of chitosan in the subphase, caused an expansion of the films, and, generally, increased their rigidity. Unexpectedly, the interaction was weaker for the negatively charged DPPG and *E. coli* extract, when compared to the neutral DPPC and DPPE. That was related to the low capacity of protonation of this chitosan, considering its relatively high degree of acetylation. Now, as expected, we verified that Ch15% affected the monolayers more strongly, which we attribute to its lower degree of acetylation. Also, monolayers containing LPS were highly affected, which may indicate that the antibacterial action of chitosan is more related to its interaction with the outer membrane, rather than with the inner. Unlike neat phospholipids, these monolayers became more rigid in the presence of chitosan. This also happened with the *E. coli* extract, which, as LPS, is highly heterogeneous, so their molecules are harder to pack. Thus, chitosans appear to facilitate their packing, probably by decreasing charge repulsion. Finally, chitosan properties proved to be determinant to their interaction with lipid monolayers, and will be important to each of its applications.

Palavras-chave: Langmuir monolayers. Chitosan. Bacterial and mammal membranes.

Agência de fomento: CAPES (88882.328744/2019-01 (processo já finalizado))

Referências:

- 1 FIAMINGO, A.; CAMPANA FILHO, S. P. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. Tuning the properties of high molecular weight chitosans to develop full water solubility within a wide pH range. **ChemRxiv**, p. 1–10, 2020. DOI: 10.26434/chemrxiv.11854293.v1.
- 2 NOBRE, T. M. *et al.* Interactions of bioactive molecules & nanomaterials with Langmuir monolayers as cell membrane models. **Thin Solid Films**, v. 593, p. 158–188, 2015. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.09.047.
- 3 JOCHELAVICIUS, K. *et al.* Chitosan effects on monolayers of zwitterionic, anionic and a natural lipid extract from *E. coli* at physiological pH. **Colloids and Surfaces B: biointerfaces**, v. 209, pt. 2, p. 112146, 2022. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2021.112146

PG176

Estudo dos dígitos menos significativos do mapa logístico

ALVARENGA, João Pedro do Valle; BRUNO, Odemir Martinez

j.p.valle@df.ufscar.br

O mapa logístico é um modelo matemático discreto amplamente conhecido por sua dinâmica caótica. (1) Tal dinâmica é caracterizada por sua complexidade, aperiodicidade e sensibilidade às condições iniciais. Além disso, esta dinâmica ocorre no intervalo real $[0, 1]$, formado por números com inúmeras casas decimais, chamado de órbita. Computacionalmente, estes números são calculados com uma precisão finita, devido a limitação de memória. Para o cálculo ser computacionalmente viável, as órbitas são normalmente arredondadas. Isto modifica significativamente as órbitas do mapa logístico. Desta forma, os dígitos menos significativos das órbitas são excluídos e raramente analisados. (2) Visando esta problemática, este trabalho explorou a dinâmica destes dígitos no mapa logístico em regime caótico. Por meio de busca exploratória, certos padrões foram observados na dinâmica dos dígitos menos significativos. Tais padrões são regidos por dígitos periódicos e fixos com comportamento análogo aos pontos fixos e periódicos dos sistemas dinâmicos discretos. Os dígitos periódicos apresentam períodos bem estabelecidos, que independem do parâmetro de controle ou da condição inicial. Enquanto, os dígitos fixos apresentam características de atração e estabilidade. Portanto, essas propriedades revelam que o mapa logístico possui uma espécie de “sub dinâmica” governada pelos dígitos menos significativos de suas órbitas.

Palavras-chave: Caos. Reconhecimento de padrões. Sistemas dinâmicos.

Agência de fomento: FAPESP (22/01935-2)

Referências:

- 1 MAY, R. M., Simple mathematical models with very complicated dynamics. **Nature**, v. 261, n. 5560, p. 459–467, 1976.
- 2 LIU, J.; ZHANG, H.; SONG, D. The property of chaotic orbits with lower positions of numerical solutions in the logistic map. **Entropy**, v. 16, n. 11, p. 5618–5632, 2014.

PG177

Análise multi-resolução inteligente: combinando a transformada wavelet com estratégias de deep learning para redução de ruídos em sinais e imagens de ressonância magnética

QUEIROZ, Guilherme Emmanuel Tagliaferro de; PAIVA, Fernando Fernandes; GUIDO, Rodrigo Capobianco

getqueiroz@usp.br

A técnica de Imagens por Ressonância Magnética (IRM) tem representado um papel importante em procedimentos médicos e de pesquisa. (1) Desde o estudo de rochas até a compreensão do funcionamento cerebral, o aspecto que a coloca nesta posição de destaque certamente é a possibilidade do estudo não invasivo do objeto de interesse. Nas últimas décadas, a tecnologia do scanner de IRM sofreu tremendas melhorias no que diz respeito a resolução espacial, velocidade de aquisição e relação sinal-ruído (SNR), imagens RM ainda são prejudicadas com degradações como inomogeneidades de intensidade de sinal (campos de polarização), ruído e outros artefatos. (2) O sinal de IRM é intrinsecamente baixo, portanto algo importante a se levar em consideração, principalmente em aplicações in vivo, é a relação entre tempo de aquisição e a qualidade final da imagem, isto é, aquisições mais curtas invariavelmente resultam em imagens mais intensamente degradadas por ruído dificultando a realização de análises apropriadas e até interferindo em etapas de pós-processamento. Devido a importância da técnica, a supressão de ruído em imagens por ressonância magnética (RM) é considerado um importante problema em aberto e que tem sido discutido frequentemente na literatura recente. (3) O termo ruído aqui se refere estritamente ao ruído térmico (ruído de Johnson-Nyquist). A variância do ruído térmico pode ser descrita como a soma de variâncias de processos estocásticos independentes relacionadas ao objeto da análise e ao equipamento. Ao contrário do problema habitual de supressão de ruído em imagens naturais onde o ruído é considerado Gaussiano, ruído em magnitude de imagens por RM normalmente segue uma distribuição de Rice. (2) De uma perspectiva estatística, a reconstrução da imagem a partir dos dados crus de IRM vai resultar na modificação da distribuição de probabilidade do sinal no domínio da imagem, além disso, uma vez que os algoritmos de reconstrução também têm evoluído e não há uma forma de prever os possíveis efeitos no ruído, este aspecto coloca ainda mais incerteza sobre a escolha de qual método de supressão adotar. Neste trabalho nos colocamos a compreender e caracterizar o ruído presente em IRM, considerando diferentes estratégias de aquisição e de reconstrução de imagens utilizadas em sistemas clínicos de Ressonância Magnética e propomos desenvolver uma estratégia de supressão de ruído baseada em transformada *wavelet* e aprendizagem profunda que apresente dependência fraca em relação aos procedimentos de aquisição e reconstrução das imagens.

Palavras-chave: Ressonância magnética. Wavelets. Deep learning.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 MANJÓN, J. V.; COUPÉ, P.; BUADES, A. MRI noise estimation and denoising using non-local PCA. **Medical Image Analysis**, v. 22, p. 35-37, 2015. DOI: 10.1016/j.media.2015.01.004.
- 2 FERNANDEZ, S. A.; FERRERO, G. V. S. **Statistical analysis of noise in MRI: modeling, filtering and estimation**. Berlin: Springer Publishing Company, 2016.
- 3 MANJÓN J. V. *et. al.* New methods for MRI denoising based on sparseness and self-similarity. **Medical Image Analysis**, v. 16, n. 1, Jan 2012. DOI: 10.1016/j.media.2011.04.003.

PG178

Septinas de *Magnaporthe oryzae*: uma abordagem estrutural

GARRATT, Richard; ARAUJO, Ana Paula Ulian de; PINTO, Andressa Patricia Alves; FERNANDEZ, Luis Alberto Valverde

lvalverde7@usp.br

As septinas são ubíquas em fungos e animais e podem ser encontradas em diversos locais nas células e podem-se envolver em muitos processos importantes na célula além da citocinese, como já foi mostrado na fagocitose, ciliogênese, polarização celular e morfogênese e outros que exigem reestruturação da membrana e/ou estruturas de suporte. (1) No fungo *Magnaporthe oryzae* que é o agente causador da brusone do arroz (2), uma rede de filamentos de actina toroidal se forma na base do apressório por meio de quatro septinas (sep3, sep4, sep5 e sep6), que formam uma estrutura de anel dinâmica, que se localiza com a os filamentos de actina. As septinas, fornecem a rigidez cortical e a curvatura da membrana necessárias para a protrusão de uma cavilha de penetração rígida para romper a superfície da folha. O objetivo deste trabalho e a caracterização estrutural das septinas de *M. oryzae*, individualmente e de seus complexos, para conseguir isso é necessário expressar em *E.coli* Rosetta (DE3), purificar e caracterizar as septinas de forma estável e depois avaliar o grau de oligomerização, teor de nucleotídeo além de realizar ensaios de cristalização; coletar dados de difração de raios-x dos cristais obtidos para resolução das estruturas, realizar ensaios de ME por contrastação negativa para confirmar a organização dos complexos com as proteínas integrais e resolver a estrutura dos complexos por Crio-ME. Atualmente conseguimos expressar sep3-sep4 em pET-28a(+), sep5-6 e sep7 em pETDuet-1 para o análise em complexo dimérico. Após purificação das amostras por cromatografia de afinidade (em coluna de níquel, as amostras foram purificadas por cromatografia de exclusão molecular (superdex200) e o cromatograma mostrou que sep3-4 e sep5-6 eluem em um volume que corresponderia ao fato de estarem formando tetrâmeros, concordando com a proposta de que o filamento seja composto da seguinte forma: sep5-sep6-sep3-sep4-sep4-sep3-sep6-sep5. Para fazer o complexo octamérico, foi expresso sep3-4 e sep5-6 em pETDuet-1 separadamente e depois copurificados em uma coluna de afinidade, o gel desnaturante SDS-PAGE mostrou que as septinas não estão sendo expressas equimolarmente e modificações nas condições também estão sendo feitas para melhorar a estabilidade e a expressão. Usando o método de Gibson Assembly (3) foram feitas subclonagens para expressar os domínios G das septinas: sep3G-sep4G, sep5G-sep6G, sep7G e sep8G e sep8GCDTM, essas subclonagens estão sendo sequenciadas para confirmar se as sequências estão corretas e continuar com os testes de expressão.

Palavras-chave: Septinas. Cristalografia. Biologia molecular.

Agência de fomento: FAPESP (2022/00152-4)

Referências:

1 VALADARES, N. F. *et al.* Septin structure and filament assembly. **Biophysical Reviews**, v. 9, n. 5, p. 481-500, 2017. DOI: 10.1007/s12551-017-0320-4.

- 2 OSÉS-RUIZ, M. *et al.* Appressorium-mediated plant infection by *Magnaporthe oryzae* is regulated by a Pmk1-dependent hierarchical transcriptional network. **Nature Microbiology**, v. 6, n. 11, p. 1383-1397, 2021. DOI: 10.1038/s41564-021-00978-w.
- 3 GIBSON, D. G. Enzymatic assembly of overlapping DNA fragments. **Methods in Enzymology**, v. 498, p. 349-361, 2011. DOI: 10.1016/B978-0-12-385120-8.00015-2.

PG179

Estudo da geração de oxigênio singlete e radical hidroxila da Protoporfirina IX e azul de metileno durante a ação fotodinâmica, sonodinâmica e sonofotodinâmica

AYALA, Erika Toneth Ponce; SOUZA, Murilo de Oliveira; ALVES, Fernanda; PRATAVIEIRA, Sebastião
erikatoneth2021@gmail.com

A terapia sonofotodinâmica (TSFD) é uma nova técnica anticancerígena não invasiva que envolve a combinação da terapia fotodinâmica (TFD) e terapia sonodinâmica (TSD) a fim de induzir uma maior geração de espécies reativas de oxigênio (EROs) que levam as células tumorais a morte. (1) Diversos estudos têm demonstrado que as moléculas empregadas como fotossensibilizadores (Ex. porfirinas, clorinas, ftalocianinas etc.) podem ser ativadas por ultrassom, sendo consideradas bons sonossensibilizadores também, e por conseguinte de grande interesse para serem aplicadas durante a TSFD. (2) Porém, não se tem estudos na literatura sobre o cálculo do rendimento quântico de EROs para fotossensibilizadores, já conhecidos, sob a ação sonofotodinâmica. Assim, este estudo visa medir e comparar a eficiência da produção de oxigênio singlete e radicais hidroxila durante a ação fotodinâmica, sonodinâmica e sonofotodinâmica para a Protoporfirina IX, Azul de metileno, Clorina e6 e Indocianina verde. Para o cálculo do rendimento quântico foi aplicado o método comparativo utilizando duas sondas de fluorescência, DPBF e APF, para a detecção do oxigênio singlete e radical hidroxila, respectivamente. (3) A ação sonofotodinâmica mostrou-se mais eficaz do que a ação fotodinâmica em termos de produção de oxigênio singlete para a PpIX, Ce6 e ICG. Enquanto, a produção de radicais hidroxila foi mais eficiente sob a ação sonofotodinâmica para as quatro moléculas estudadas. Esses resultados mostram que tais moléculas podem ser consideradas bons sonofotossensibilizadores, e que o efeito sonofotoquímico desempenha um papel importante no aumento do efeito terapêutico da TSFD.

Palavras-chave: Rendimento quântico. EROs. Sonofotodinâmica.

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

Referências:

- 1 GÜZEL, E. *et.al.* Ultrasound versus light: exploring photophysicochemical and sonochemical properties of phthalocyanine-based therapeutics, theoretical study, and in vitro evaluations. **ACS Applied Bio Materials**, v.5, n.3, p.1139-1150, 2022.
- 2 ZHENG, Y. *et.al.* Recent progress in sono-photodynamic cancer therapy: from developed new sensitizers to nanotechnology-based efficacy-enhancing strategies. **Acta Pharmaceutica Sinica B**, v.11, n.8, p. 2197-2219, 2021.
- 3 ATMACA, G. Y.; KARANLIK, C. C.; ERDOĞMUŞ, A. Measurement of improved singlet oxygen generations of indium chloride phthalocyanines by comparatively sono-photochemical and photochemical studies. **Dyes and Pigments**, v. 194, p. 109630, 2021.

PG180

Automação de um FrontEnd de RMN para controle de periféricos de baixa velocidade

MONTES, Rafael Silva; TANNUS, Alberto

rafael.silva.montes@usp.br

O desenvolvimento de técnicas de ressonância magnética tem se mostrado fundamentais pois elas têm grande aplicabilidade na indústria, em análises clínicas, no estudo morfológico da estrutura do material, entre outros. Assim, o desenvolvimento de um espectrômetro com ampla aplicabilidade, como o desenvolvido pelo grupo CIERMag, tem ampla relevância. (1) Tal espectrômetro necessita de circuitos para intermediar as transmissões e recepções dos sinais captados e gerados. Ao conjunto destes, reconhecemos como o FrontEnd desse espectrômetro. A este deve ser associado um controle que o prepare para os experimentos que forem almejados no sistema ao qual forem inseridos. Este trabalho propõe a automação deste FrontEnd por meio de uma biblioteca desenvolvida em Python 3, sendo que esta prevê a utilização de uma rede de Raspberry Pi como o meio para realizar este controle. Esta biblioteca contém classes e métodos específicos para as partes do FrontEnd e para a comunicação entre Raspberry Pi e terminais clientes que irão operar o FrontEnd. A dinâmica entre as Raspberry Pi e o FrontEnd ocorre por meio do protocolo SPI e foram desenvolvidos soquetes TCP/IP para a manipulação da rede de Raspberry Pi.

Palavras-chave: Automação. FrontEnd de um espectrômetro. Ressonância magnética nuclear.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 SILVA, D. M. D. D. **Desenvolvimento de console multiplataforma para aquisição, organização e visualização de dados do espectrômetro digital de RM do CIERMag: ToRM console.** 2014. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

PG181

Diagnóstico precoce e não invasivo de tumor usando nanossensores de atividade proteolítica

SILVA, Erica; ZUCOLOTTI, Valtencir

erica.corina@usp.br

O diagnóstico do câncer em estágios iniciais é o fator determinante da cura. (1) Contudo, a maioria dos casos é diagnosticada nos estágios avançados quando focos de metástase estão espalhados por órgãos distantes. (1-2) Tecnologias de imagem não distinguem tumores malignos de 1 mm, quando são capazes de estimular a formação de vasos sanguíneos próprios, e os testes para os poucos biomarcadores endógenos disponíveis têm baixo poder preditivo, identificando menos de 25% dos pacientes com câncer. (2) A nanoengenharia de biomarcadores sintéticos promete transpor essas barreiras no diagnóstico precoce do câncer. (2-3) Nós desenvolvemos e comprovamos a ativação de nanossensores de atividade proteolítica que liberam um biomarcador sintético no microambiente do tumor, viabilizando a sua detecção na urina. O diâmetro hidrodinâmico dos nanossensores foi estimado pelo espalhamento dinâmico da luz, a carga de superfície por mobilidade eletroforética combinada com a velocimetria de efeito Doppler, e as propriedades ópticas por espectrofotometria de absorção da luz no UV/vis e de fluorescência. Ensaio enzimáticos *in vitro* utilizando sondas contendo substratos com transferência ressonante de energia por fluorescência comprovaram a ativação proteolítica dos nanossensores e permitiram a estimação dos parâmetros cinéticos de liberação do biomarcador sintético. Os resultados demonstram que os nanossensores têm as propriedades de agentes pró-diagnóstico para a detecção do câncer, o que permite que este estudo avance na formulação de um modelo farmacocinético do nanossensor e do biomarcador sintético para investigar estratégias de detecção precoce e não invasiva do câncer de fígado.

Palavras-chave: Nanomedicina. Biossensores. Marcadores exógenos.

Agência de fomento: CAPES (88887.474259/2020-0)

Referências:

- 1 CROSBY, D. *et al.* Early detection of cancer. **Science**, v. 375, n. 1244 p. 1-11, 2022.
- 2 PASHAYAN, N.; PHAROAH, P. D. P. The challenge of early detection in cancer: tumor growth dynamics and the timing of metastasis impose limits on cancer screening. **Science**, v. 368, n. 6491, p. 489-490, 2020.
- 3 KWONG, G. *et al.* Mass-encoded synthetic biomarkers for multiplexed urinary monitoring of disease. **Nature Biotechnology**, v. 31, n. 1, p. 63-70, 2013

PG182

Comportamento crítico e informação quântica em um modelo XY não hermitiano

RAMOS, Lucas; ALCARAZ, Francisco

lucas.morais@ifsc.usp.br

Recentemente foi proposta uma nova família de cadeias quânticas XY com N interações multispins e simetria $U(1)$. (1) Esta nova classe de modelos é interessante pois além de resgatar a cadeia XY padrão (caso $N = 2$), ela também engloba cadeias quânticas que são não hermitianas (para $N > 2$) e exatamente solúveis por transformação de Jordan-Wigner. Neste trabalho, consideramos o caso particular em que $N = 3$, o que origina uma cadeia quântica não hermitiana e com interações entre primeiros e segundos vizinhos. Para acoplamentos isotrópicos, as correções de tamanho finito do estado fundamental indicam que o modelo é invariante conforme e está na mesma classe de universalidade do modelo Gaussiano e dos líquidos de Luttinger, com carga central $c = 1$ e uma velocidade do som não trivial. As dimensões anômalas obtidas estão de acordo com as previsões da teoria de campo conforme. (2) Esperamos que esta classe de universalidade também possa ser determinada através dos efeitos de tamanho finito das entropias de emaranhamento e da informação mútua. (3)

Palavras-chave: Invariância conforme. Cadeia quânticas de spins. Emaranhamento.

Agência de fomento: CNPq (130157/2021-0)

Referências:

- 1 ALCARAZ, F. C.; PIMENTA, R. A. Free-parafermionic $Z(N)$ and free-fermionic XY quantum chains. **Physical Review E**, v. 104, n. 5, p. 054121, Nov. 2021.
- 2 ALCARAZ, F. C. *et al.* Conformal invariance, the XXZ chain and the operator content of two-dimensional critical systems. **Annals of Physics**, v. 182, p. 280-343, Mar. 1988.
- 3 ALCARAZ, F. C. Universal behavior of the Shannon mutual information in nonintegrable self-dual quantum chains. **Physical Review B**, v. 94, n. 11, p.115116, Sept. 2016.

PG183

Estratégias de inativação fotodinâmica no controle do biofilme de *Pseudomonas aeruginosa*

NAKADA, Paulo Junior Tadayoshi; ALVES, Fernanda; POLIKARPOV, Igor; KURACHI, Cristina

paulinho.nakada@gmail.com

De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS), a resistência antimicrobiana (RAM) é um dos principais problemas de saúde global. A formação e estabelecimento de biofilmes bacterianos aumenta ainda mais a tolerância aos tratamentos, uma vez que os microrganismos estão inseridos em uma matriz extracelular que impossibilita a permeabilidade dos agentes antimicrobianos, gerando outro desafio para o controle bacteriano. Com base no nível de prioridade expresso pela OMS, uma bactéria que frequentemente causa infecções em humanos é a *Pseudomonas aeruginosa* que possui uma alta capacidade adaptativa de seu genoma, complexos mecanismos de resistência antimicrobiano e elevados custos para os tratamentos, tornando-se um grave problema e um excelente modelo para estudar formas de tratamentos alternativos para atuar em paralelo aos antibióticos. Uma das alternativas para esse problema, é a utilização da terapia fotodinâmica (TFD) que é uma técnica conceituada, segura, eficaz e que não gera RAM comprovada, além de possuir um amplo espectro de ação em comparação com os antibióticos. Com a finalidade de melhorar a distribuição e permeabilidade do FS em biofilmes e, consequentemente, aumentar a inativação fotodinâmica (IFD) contra biofilmes de *P. aeruginosa*, o foco deste estudo será utilizar enzimas em conjunto com a TFD para comprometer a matriz extracelular ou adicionar iodeto de potássio para elevar os efeitos da IFD. Os testes enzimáticos trouxeram que a CTEC (0,3 mg/ml) apresentou melhor redução percentual da biomassa do biofilme de *P. aeruginosa* reduzindo cerca de 50% do total, no entanto, não foi capaz de inativar as bactérias presente no biofilme. Já os testes utilizando apenas TFD, foram avaliados as formas planctônicas e biofilmes de *P. aeruginosa* utilizando diversos FSs com variações dos seus parâmetros, sendo que o FS que apresentou melhores resultados para a forma planctônica foi o MB com 90,8 % de redução na escala log. E para os resultados contra biofilmes, nenhum FS testado apresentou redução. Na tentativa de unir as técnicas já testadas a associação de enzima (CTEC) e TFD também não trouxeram resultados satisfatórios e com elevadas eficiências em relação a inativação dos biofilmes bacterianos, sendo necessário a busca por outras alternativas que eleve essa eficiência e que consiga afirmar a substituição da utilização de antibióticos com técnicas alternativas de tratamento. Então, por fim, os resultados obtidos utilizando TFD com adição de iodeto de potássio (KI) na solução contendo os FSs testados (MB e neMB) apresentaram resultados bastante promissores, onde foi visto que os efeitos da fotoinativação decorrentes da TFD são potencializados com a adição de KI, produzindo espécies reativas de iodo, que provavelmente possuem um tempo de vida mais longo que as espécies reativas de oxigênio (EROs), entretanto ambos os produtos são essenciais para obtenção dos resultados observados de erradicação total dos biofilmes analisados. (1) A adição de KI, que é um sal inorgânico, não possui toxicidade e é fácil de ser manipulado, o que torna os próximos passos replicáveis e palpáveis na evolução de estudos pré-clínicos e clínicos que seria o foco para os próximos experimentos.

Palavras-chave: Biofilme. KI. TFD.**Agência de fomento:** Sem auxílio

Referências:

- 1 HAMBLIN, M. R. Potentiation of antimicrobial photodynamic inactivation by inorganic salts. **Expert Review of Anti-infective Therapy**, v. 15, n. 11, p. 1059–1069, Nov. 2017. DOI: 10.1080/14787210.2017.1397512.

PG184

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

CAMARGO, Gabriela Missurini de; MIRANDA, Marcela; PINTO, Fabio; GUIMARAES, Francisco Eduardo

gabriela.missurini.camargo@usp.br

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

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

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

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

PG185

Estudo de eficiência de algoritmos para fixação de gauge de Landau $SU(2)$ em temperatura finita e $SU(3)$ em temperatura zero

CERQUEIRA, Matheus Costa; LEAL JUNIOR, Jesuel Marques; MENDES, Tereza

matheus.c.cerqueira@gmail.com

A cromodinâmica quântica (QCD) é a teoria de gauge que descreve as interações fortes através de um modelo de quarks, no qual estes interagem por troca dos campos dos glúons. Uma característica importante desta teoria é que ela apresenta comportamentos distintos quando se está em um regime de altas e baixas energias. Em especial, no limite de baixas energias, é observado que os quarks e glúons estão confinados em partículas chamadas de hádrons, através dos estados ligados de quarks. Uma das maneiras de estudar este comportamento é através de métodos não perturbativos, entre os quais utilizamos o da QCD na rede. Este método é o mais bem estabelecido para se trabalhar com QCD em baixas energias, tornando-se uma ferramenta indispensável para melhor compreensão destes fenômenos e suas quantidades mensuráveis. Este trabalho utiliza de simulações numéricas com métodos de Monte Carlo para estudar os modelos de QCD na rede em $SU(2)$ e $SU(3)$, tendo como objetivo a análise da transição de fase a temperatura finita (1), utilizando o parâmetro de ordem da teoria (loop de Polyakov). Este trabalho está utilizando apenas a implementação de um regime de puro gauge (ausência de quarks), estudando mais especificamente o propagador dos glúons utilizando a fixação de gauge de Landau em redes assimétricas (temperatura finita) (2), para melhor compreensão no futuro do comportamento do propagador ao redor da temperatura crítica de transição tanto em $SU(2)$ quanto em $SU(3)$. Foi feito um estudo de eficiência para a fixação de gauge de Landau para $SU(2)$ em temperatura finita e $SU(3)$ em regime sem temperatura. Para $SU(2)$, o objetivo foi encontrar qual o melhor algoritmo a partir de uma variação de temperatura. Já para $SU(3)$, o objetivo foi encontrar o melhor algoritmo em regime sem temperatura. (3)

Palavras-chave: QCD na rede. Temperatura finita. Fixação de Gauge.

Agência de fomento: CNPq (142301/2017-5)

Referências:

- 1 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice, an introductory presentation**. Berlin: Springer, 2010.
- 2 KANAYA, K. Lattice results on the phase structure and equation of state in QCD at finite temperature. **AIP Conference Proceedings**, v. 1343, n. 1, p. 57-62, 1964.
- 3 SUMAN, H.; SCHILLING, K. E. A comparative study of gauge fixing procedures on the connection machines CM2 and CM5. **Parallel Computing**, v. 20, n. 7, p. 975-990, 1994

PG186

Estudo Estrutural da enzima ThiL em patógenos Gram-negativos

FARRO, Erick Giancarlo Suclupe; NASCIMENTO, Alessandro Silva

esuclupef@ifsc.usp.br

A resistência a antibióticos é um problema global e urgente. Uma estimativa feita pela OMS indica que, em 30 anos, teremos em torno de 10 milhões de mortes anuais em decorrência direta de infecções causadas por organismos resistentes a antibióticos. (1) O problema é agravado pelo número limitado de vias/alvos sobre os quais agem os antibióticos atualmente disponíveis. De acordo com Walsh e Wencevitz, (2) os antibióticos atualmente existentes são restritos a apenas cinco alvos/vias de ação. Desta forma, somam-se (i) a difusão de cepas resistentes, (ii) o número decrescente de novos antibióticos ou de moléculas inovadoras, e (iii) o número reduzido de alvos sobre os quais os antibióticos agem. Recentemente, a enzima tiamina fosfato quinase (ThiL) foi validada como um novo alvo para o desenvolvimento de antibióticos contra *Pseudomonas aeruginosa*. Esta enzima faz parte da via de síntese de tiamina (vitamina B1) presente em muitos microrganismos e em plantas, mas ausente em mamíferos. Mostrou-se recentemente que a deleção (ou inibição) da enzima ThiL causa defeitos de crescimento em *P. aeruginosa* e reduz a virulência da bactéria. (3) Neste projeto, propomos um estudo da relação estrutura-função sobre a enzima ThiL em organismos importantes do ponto de vista clínico, dentre os quais *Klebsiella pneumoniae* e *Escherichia coli*. Para esta finalidade os genes para as enzimas ThiL de *K. pneumoniae* (KpThiL) e *E. coli* (EcoThiL) foram sintetizados com otimização de códons para a expressão bacteriana e a metodologia empregada envolve a expressão e purificação por afinidade ao metal e por exclusão por tamanho. Experimentos iniciais de DSF (Differential Scanning Fluorimetry) serão realizados para mapear a interação das enzimas com os substratos visando experimentos de co-cristalização. Os primeiros resultados indicam que as proteínas de KpThiL e EcoThiL são bem expressas em *E. coli* Rosetta, e são purificadas na fração solúvel, com um rendimento médio de 12 e 9 mg/mL respectivamente. Os ensaios com o DSF variando pH e concentração de NaCl sugeriram uma estabilidade máxima em um pH 8.0 e em uma concentração de 700 mM de sal. A mesma técnica também revelou o aumento da estabilidade térmica na presença de Mg²⁺ e ADP. Alguns cristais foram obtidos nos primeiros experimentos, mas ainda não foi possível a obtenção de um conjunto de dados de difração. Até o momento, concluímos que as proteínas são solúveis e obtidas em um rendimento razoável, o que permite prosseguir nos estudos de estrutura-função e, eventualmente, em estudos prospectivos de inibidores potenciais.

Palavras-chave: Estrutura-e-função-de-proteínas. Gram-negativo. Resistência-antibióticos.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 CENTERS FOR DISEASE CONTROL AND PREVENTION. **Antibiotic resistance threats in the United States**. 2019. DOI: 10.15620/cdc:82532. Disponível em: <https://www.cdc.gov/drugresistance/pdf/threats-report/2019-ar-threats-report-508.pdf>. Acesso

em: 17.01.23.

2 WALSH, C.T.; WENCEWICZ, T.A. Prospects for new antibiotics: a molecule-centered perspective. **Journal of Antibiotics**, v. 67, p. 7–22, 2014. DOI: 10.1038/ja.2013.49.

3 KIM, H. J. *et al.* The ThiL enzyme is a valid antibacterial target essential for both thiamine biosynthesis and salvage pathways in *Pseudomonas aeruginosa*. **Journal of Biological Chemistry**, v. 295, p. 10081–10091, 2020. DOI: 10.1074/jbc.ra120.013295.

PG187

Síntese e resultados pré-eliminatórios das propriedades estruturais, morfológicas e fotocatalíticas em efeito do PH do fotocatalisador VIBO4

HERRERA, Jessenia Brillit Villaverde; GONÇALVES, Renato Vitalino; ROSA, Washington Santa

jvillaverde@usp.br

A dependência da produção de energia a partir de combustíveis fósseis como petróleo, gás natural e carvão pode resultar na emissão de grandes quantidades de dióxido de carbono (CO₂) para o meio ambiente, o que leva a graves problemas ambientais como o efeito estufa, que afeta a vida em pequenas e grandes cidades. Atualmente, a captura e conversão de CO₂ em outros combustíveis tem sido apontada como uma forma ecologicamente correta de grande interesse econômico. A energia solar é uma das fontes de energia mais abundantes do planeta; Aproximadamente $1,3 \times 10^5$ TW de energia solar atinge a superfície da Terra, que é 10.000 vezes mais do que o consumo de energia atual. Outra fonte de energia utilizada mundialmente é a nuclear, que, embora não emita poluição diretamente no meio ambiente, gera rejeitos radioativos, que com o passar do tempo se tornam um grande problema, além do risco iminente de acidentes. Por isso, cresce o interesse pelas chamadas fontes de energia verde que não geram resíduos ou poluição, utilizando uma grande fonte de energia que está à nossa disposição há bilhões de anos: o sol. (1-3) Nesta proposta de pesquisa o objetivo é analisar a conversão de CO₂ que produz o material Vanadato de Bismuto utilizando a energia solar e transformar o CO₂ em produtos químicos e combustíveis de alto valor agregado, como metanol, etanol, metano e ácido fórmico. Além disso, estudar as propriedades estruturais e morfológicas do BiVO₄ aplicado na fotossíntese artificial suspensa. O fotocatalisador BiVO₄ foi sintetizado através da síntese hidrotérmica utilizando os precursores NH₄VO₃ (1.164 gr) e Bi(NO₃)₃ 5 H₂O (4,843gr) ambos com 99% de pureza em uma solução de 2M de HNO₃ até atingir uma temperatura de 180°C por um tempo de 18 horas. Através da regulação da acidez da solução com pH igual 1 pretende-se chegar à fase monoclínica e demonstrar a relação entre morfologia, estrutura cristalina e pH com o objetivo de melhorar a eficiência dos fotocatalisadores sob a conversão de energia solar. Por meio do tratamento hidrotérmico, os resultados mostraram uma transformação da fase de mudança para a fase de sheelita monoclínica com picos de difração característicos de 15. 18°, 18. 68°, 18. 96°, 28. 82°, 28. 88°, 28. 94° e 30. 56° sob a técnica de difração de raios-X e um tamanho médio de cristal de 39,67 nm usando a equação de Scherrer e o modelo gaussiano. Da mesma forma, uma banda característica e intensa é apresentada em Espectroscopia Raman em 830. 47 cm⁻¹ representando o modo de alongamento do vínculo V-O na fase de sheelita monoclínica. Finalmente, a fotoredução de CO₂ de uma pequena quantidade de amostra (25 mg) em uma solução de 50 mL sob fluxo constante de CO₂ (1,2 mL/min) por 30 min e uma irradiação de 500 mW para um processo de 3 horas indicam uma concentração de produtividade de $8,56 \times 10^{-6}$ mol/cm²h demonstrando uma fotoatividade proporcionalmente linear em relação ao aumento do tempo de reação.

Palavras-chave: Fotocatalisadores. BiVO₄. Fotorredução de CO₂.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 ZHAO, Y. *et al.* Significance of crystal morphology controlling in semiconductor-based photocatalysis: a case study on BiVO₄ photocatalyst. **Crystal Growth & Design**, v. 17, n. 6, p. 2923-2928, 2017.
- 2 ALBUQUERQUE, M. **Síntese, caracterização e estudo das propriedades fotoeletrocatalíticas dos fotoanodos bivo4e BiVO₄/FeOOH.** 2015. 92 p. Dissertação (Mestrado em Química) – Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2015.
- 3 HAN, Q. *et al.* Elegancy construction of ZnIn₂S₄/BiVO₄ hierarchical heterostructures as direct Z-scheme photocatalysts for efficient CO₂ photoreduction. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 13, n. 13, p. 15092-15100, 2021.

PG188

Quantum Machine Learning applications on NV centers

DOMINGUES, Artur Venturelli; MUNIZ, Sérgio Ricardo

artur.domingues@usp.br

Machine learning (ML) and Artificial intelligence (AI) have assisted in many great ways the advances in science in these last few years. ML algorithms are based on Statistical analyses and can find patterns among data that are highly difficult for humans to find. There is a new field in quantum mechanics that have been developed called Quantum Machine Learning (QML), that envision using ML techniques to control quantum processes, model quantum systems and use quantum computers to improve some of the known classical machine learning algorithms. (2) In our work we intend to simulate and control a system based-off of defects on diamonds, particularly Nitrogen defects on diamonds known in the literature as Nitrogen-vacancy color centers or NV for short. These defects have large coherence times in room temperature and can be used in quantum protocols to serve as quantum sensors, quantum processors or even quantum simulators. (1-3) For the past decade the most known application to NVs where as quantum sensors. We intend, in our work, to use some state of the art quantum simulation tools to simulate our NV system in real quantum computers such as IBM or Google and to use machine learning techniques to improve our ability to control and improve these simulations and with that be able to use this system as a sensor or as a platform to simulate other quantum systems.

Palavras-chave: NV centers. Quantum machine learning. Quantum simulation.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 JU, C. *et al.* NV-center based digital quantum simulation of a quantum phase transition in topological insulators. **Physical Review B**, v. 89, n. 4, p. 045432, 2014.
- 2 HUANG, H.-Y. *et al.* Quantum advantage in learning from experiments. **Science**, v. 376, p. 1182–1186, 2022.
- 3 BASSMAN, L. *et al.* Simulating quantum materials with digital quantum computers. **Quantum Science and Technology**, v. 6, n. 4, p. 043002, 2021.

PG189

Preparation of mesoscopic atomic superpositions via superradiance

ROCHA, Leandro; MOUSSA, Miled Hassan Youssef

7lm2ar@gmail.com

In this work, we will deal with the effects of a coherent electromagnetic field acting on an atomic dipole gas confined in a cavity. It is known from reference (1) that in such conditions if we have a moderate dense sample of N atoms, we can observe the existence of super-radiance, i.e., the emission of a coherent pulse of intensity proportional to N^2 . However, it is expected that, due to momentum conservation, such a phenomenon would cause a deflection on the atoms of the sample, after which we would have a mesoscopic superposition containing all the information related to the prior state. Our main goal is the study of the deflection suffered by the atoms of such a sample, as done in reference (2), and how it relates to the state before the emission. We solve the time-dependent non-linear Hamiltonian related to the superradiant emission, the same seen in reference (3), via the Lewis-Riesenfeld invariant method. In the end, we will show how the macroscopic states were prepared to obtain our results.

Palavras-chave: Superradiância. Modelo de Dicke. Oscilações de Rabi.

Agência de fomento: CAPES (Não se aplica)

Referências:

- 1 MIZRAHI, S. S.; MEWES, M. A. Pulsed superradiant emission from a magnetic dipole system. **International Journal of Modern Physics B**, v. 7n .12, p. 2353-2365, 1993.
- 2 FREYBERGER, M.; HERKOMMER, A. M. Probing a quantum state via atomic deflection. **Physical Review Letters**, v. 72, n. 13, p. 1952, 1994.
- 3 DOURADO, R. A.; MOUSSA, M. H. Y. Coherent many-body Rabi oscillations via superradiance and superabsorption and the mean-field approach for a superradiant laser. **Physical Review A**, v. 104, n. 2, p. 023708, 2021.

PG190

Interações átomo-cavidade em cavidade anelar com estrôncio

PESSOA JUNIOR, Claudio; COURTEILLE, Philippe Wilhelm; RIVERO, Dalila; FRANÇA, Gustavo; TEIXEIRA, Raul Celistrino

peessoa.claudio@ifsc.usp.br

Desenvolveu-se um interferômetro de onda de matéria com alta resolução, por meio de uma rede óptica periódica em uma cavidade anelar, que em conjunto com átomos de estrôncio ultra-frios (temperaturas próximas ao limite de recuo fotônico) nos permite observar as interações átomo-cavidade. Inspirado por (1), foram aplicadas armadilhas magneto-ópticas para resfriamento e aprisionamento e armadilha dipolar na cavidade. Em busca de se observar efeitos que demonstram a presença de interações átomo-cavidade, como Normal Mode Splitting (NMS) e Collective Atomic Recoil Lasing (CARL), foram realizadas mudanças experimentais que permitem a observação destes fenômenos, além de estudos em conjunto de modelo teóricos e computacionais. Visando facilitar a compreensão, foi utilizado como guia para NMS o trabalho realizado por CULVER, R *et al* (2), sendo então observada a característica da não-linearidade do piezo-elétrico que controla o tamanho dessa cavidade óptica. Foi observado o NMS e com o intuito de se aprimorar a observação do fenômeno estão sendo realizadas alterações experimentais que permitirão maior estabilidade no sistema. Futuramente se tem como objetivo analisar oscilações de Bloch, efeito CARL, spin-squeezing e superradiante laser.

Palavras-chave: Estrôncio. Cavidade anelar. Átomos frios.

Agência de fomento: FAPESP (Não se aplica)

Referências:

- 1 RIVERO, D. *et al*. High-resolution laser spectrometer for matter-wave interferometric inertial sensing with non-destructive monitoring of Bloch oscillations. **Applied Physics B**, v. 128, p. 44, 2022. DOI: 10.1007/s00340-022-07772-4.
- 2 CULVER, R. *et al*. Collective strong coupling of cold potassium atoms in a ring cavity. **New Journal Physics**, v. 18, n. 11, p. 113043, 2016. DOI: 10.1088/1367-2630/18/11/113043.

PG191

Remoções de arestas condicionadas por maleabilidade e seus efeitos na ativação de nós em redes complexas.

FURUTA, Roberto Hiroshi Matos; COSTA, Luciano da Fontoura

roberto.furuta@usp.br

Rede complexa é a denominação dada a um grafo que é utilizado para representar e estudar um sistema complexo. Neste tipo de modelo, cada nó representa uma entidade do sistema e cada aresta representa uma conexão (ou interação) entre estas. Um sistema é dito complexo quando uma simples generalização das propriedades locais ao redor de uma entidade não é suficiente para explicar características gerais da rede. O estudo de redes complexas pode ser realizado sob dois olhares: estudo de estrutura e estudo de dinâmica. (1) Em estudos de estrutura (ou de topologia), analisa-se a conformação de nós e conexões da rede (grau médio, coeficiente de agrupamento médio, etc.); já em estudos de dinâmica, estuda-se processos que ocorrem sobre tal rede (caminhadas aleatórias, simulações epidemiológicas, sincronização de osciladores, etc.). Dado o fato de que muitas das redes de interesse têm sua estrutura mutável, Silva, Comin e Costa propuseram, em 2019, uma medida chamada maleabilidade, com o fim de quantificar a diversidade de estruturas que podem surgir, quando uma rede é sujeita a modificações. (2) Neste trabalho, estudamos a maleabilidade de redes modelos, quando sujeitas a remoções consecutivas de arestas, selecionadas por critérios variados. O cálculo da maleabilidade requer um parâmetro que seja monitorado para determinar o desdobramento da rede, e, para isso, foi selecionado o coeficiente de agrupamento médio (*average clustering coefficient*) generalizado para redes dirigidas. (3) Com o fim de realizarmos um estudo de dinâmica, analisamos como a correlação entre grau e ativação de nó foi afetada, em decorrência dos diferentes critérios de remoção de arestas utilizados.

Palavras-chave: Sistemas complexos. Redes complexas. Grafos.

Agência de fomento: CAPES (88887.482594/2020-00)

Referências:

- 1 COSTA, L. da F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; VILLAS BOAS, P. R. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2017. DOI: 10.1080/00018730601170527.
- 2 SILVA, F. N.; COMIN, C. H.; COSTA, L. da F. Malleability of complex networks. **Journal of Statistical Mechanics : theory and experiment**, v. 2019, n. 8, p. 083203-1-083203-15, 2019. DOI: 10.1088/1742-5468/ab2ad1.
- 3 FAGIOLO, G. Clustering in complex directed networks. **Physical Review E** v. 76, n. 2, p. 026107-1-026107-8, 2007. DOI: 10.1103/physreve.76.026107.

PG192

Aprendizado de características texturais complexas com redes neurais randomizadas em grafos

ZIELINSKI, Kallil Miguel Caparroz; BRUNO, Odemir Martinez; RIBAS, Lucas Correia

kallil@usp.br

A análise de textura em tarefas de visão computacional é considerado como uma abordagem fundamental em métodos de classificação, pois além de ser possível a visualização de propriedades texturais em vários objetos da natureza, essas propriedades nos permitem distingui-los. Dentre várias diferentes abordagens para extração de texturas em uma imagem, como métodos estatísticos, espectrais ou estruturais, há também métodos que analisam a complexidade da imagem e usufruem de técnicas de aprendizado para obter características que possam distinguir diferentes classes de texturas. Entretanto, estes métodos de análise de textura necessitam de uma boa relação entre complexidade computacional e desempenho. Portanto, neste trabalho, é proposto uma simples, porém eficiente, abordagem que combina Redes Neurais Randomizadas (RNN - Randomized Neural Networks) com Redes Complexas (CN - Complex Networks) como forma de extração de características de texturas. Uma RNN é uma rede neural que possui um algoritmo de aprendizado extremamente rápido, baseado em conceitos de álgebra linear, enquanto CNs são reconhecidas por um bom desempenho em estudos anteriores envolvendo análise de texturas. Neste trabalho, modelamos a imagem como uma rede direcionada, e em sequência, obtemos características estruturais dessa rede, como grau e força, que serve como entrada para a RNN, que é treinada para extrair características das imagens. Por fim, essas características são utilizadas por um classificador. Para o processo de modelagem da imagem, utilizamos o procedimento proposto por Ribas *et al.* (1), em que cada imagem é modelada como uma rede ponderada e direcionada. Cada pixel da imagem representa um vértice da rede, e as arestas representam as conexões entre os pixels. Ao final da modelagem, são extraídas as medidas de grau de saída, força de entrada e força de saída de cada pixel. Após modelada a imagem e extração das características topológicas da CN, essas características são utilizadas como entrada para a RNN, que irá treinar seus pesos de forma que cada textura tenha um vetor de características diferente. Por fim, os vetores de características produzidos pela RNN são inseridos em um classificador. Para a avaliação dos métodos, utilizamos bases de dados conhecidas pela literatura 1. Outex: Possui 1360 imagens de textura, divididas em 68 classes, totalizando 20 imagens por classe; 2. USPTex (2): Composto por 2292 imagens, divididas em 191 classes, com 12 imagens por classe; 3. 1200Tex (3): 1200 imagens de folhas, divididas em 60 classes. Após a aplicação dos métodos nas bases de dados mencionadas, foi comparada a acurácia do método com resultados de outros métodos da literatura. Para nosso método foram utilizados dois vetores de características que performaram melhor nas bases de dados mencionadas. Resultados indicaram um significativo aumento de desempenho em ambos os vetores utilizados, em comparação com os outros métodos da literatura. Além dos ótimos resultados de acurácia obtidos, é importante enfatizar que nosso método proposto também possui uma ótima complexidade computacional devido ao uso do algoritmo de aprendizado rápido da RNN. Portanto, este trabalho enfatiza que a combinação entre redes complexas e redes neurais randomizadas são uma combinação promissora em tarefas de análise de texturas.

Palavras-chave: Redes complexas. Visão computacional. Extração de características.

Agência de fomento: CAPES (88887.631085/2021-00)

Referências:

- 1 RIBAS, L. C. *et al.* Fusion of complex networks and randomized neural networks for texture analysis. **Pattern Recognition**, v. 103, p. 107189, 2020.
- 2 BACKES, A. R.; CASANOVA, D.; BRUNO, O. M. Color texture analysis based on fractal descriptors. **Pattern Recognition**, v. 45, n. 5, p. 1984–1992, 2012.
- 3 CASANOVA, D.; SA JUNIOR, J. J. M.; BRUNO, O. M. Plant leaf identification using Gabor wavelets. **International Journal of Imaging Systems and Technology**, v. 19, n. 3, p. 236–243, Sept. 2009. DOI: 10.1002/ima.20201

PG193

O papel do ligante na estabilidade de nanopartículas Bi₂S₃

GALAIN, Isabel; MORENO, Natalia Sanchez; ZUCOLOTTI, Valtencir; BARTHABURU, María Perez; AGUIAR, Ivana

isabelgalain@gmail.com

O câncer é uma das principais ameaças à saúde humana devido ao grande número de casos e alta taxa de mortalidade, que deve aumentar nos próximos anos, segundo a Agência Internacional para Pesquisa em Câncer. (1) Embora a radioterapia seja a principal via de tratamento, ela não é específica para células tumorais, afetando também as células saudáveis. Os radiosensibilizadores são uma solução nova e simples para esse problema, pois aumentam a quantidade de radiação que uma célula pode absorver, permitindo tratamentos com uma dose menor de radiação, levando a menos efeitos secundários para o paciente. (2) Neste trabalho, focamos em nanopartículas de sulfeto de bismuto (Bi₂S₃), que possuem propriedades interessantes para serem usadas como radiosensibilizadores, como sua alta densidade, alto coeficiente de absorção para raios X e gamma e baixa toxicidade. Em nosso trabalho, as nanopartículas foram obtidas pelo método "hot injection" seguido de uma troca de ligante apolar-polar. A identidade das nanopartículas foi verificada por XRD e espectroscopia Raman, e as imagens de TEM mostraram bastonetes medindo em média 4,1 nm de largura e 20,2 nm de comprimento. Confirmamos que quando as células de câncer de mama MCF 7 foram irradiadas na presença das nanopartículas, sua viabilidade diminuiu cerca de 40%. (3) No entanto, esse resultado varia de acordo com a estabilidade da suspensão das nanopartículas, que são instáveis em meio biológico, afetando diretamente os ensaios in vitro e in vivo. Para melhorar a estabilidade da suspensão das nanopartículas, diferentes estratégias foram utilizadas. Primeiramente, o ligante foi trocado com sucesso por polivinilpirrolidona (PVP) ou polietilenoglicol (PEG), confirmado por análises de Diffuse FTIR e TG-DSC. Em seguida, as membranas celulares das linhagens MCF 7 e A549 foram extraídas e utilizadas para recobrir os nanobastões de Bi₂S₃ utilizando sonicação. As membranas foram caracterizadas com análises de DLS, NTA, BCA. Imagens de TEM mostraram que o conjunto membrana-nanobastões estava bem formado. As suspensões de nanopartículas foram analisadas por DLS, NTA e potencial zeta para estudar a estabilidade ao longo do tempo. As análises mostraram que o conjunto nanopartículas-membrana foi o mais estável em água e meios de cultura, o que auxilia a capacidade das nanopartículas de interagir com as células em estudos in vitro e se mover na corrente sanguínea em estudos in vivo.

Palavras-chave: Sulfeto de Bismuto. Radiosensibilizador. Nanomedicina.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. International Agency for Research on Cancer. **Globocan 2018 World Report**. Disponível em: <https://www.uicc.org/news/global-cancer-data-globocan-2018>. Acesso em: 09.12.22.

2 GONG, L. *et al.* Application of radiosensitizers in cancer radiotherapy. **Internacional Journal of Nanomedicine**, v. 16, p. 1083-1102, 2021.

3 GALAIN, I. *et al.* Enhancement of radiation response of breast cancer cells through the incorporation of Bi₂S₃ nanorods. **Journal of Nanoparticles Research**, v. 24, p. 68, 2022. DOI: 10.1007/s11051-022-05455-x.

PG194

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

CORREIA, Danilo Silva; TANNUS, Alberto

dacorriea@gmail.com

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

Palavras-chave: Python magnetic resonance framework. Ressonância magnética. Espectrômetro digital de RM.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

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

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

PG195

Método de fitting de estruturas de bandas a partir de estratégias envolvendo propriedades de simetria

WANDERLEY, Adilson Barros; SIPAHI, Guilherme Matos

adilson.wanderley@usp.br

Fundamentais nas sociedades contemporâneas, os semicondutores são peças-chave, por exemplo, na construção de células solares e nos computadores e celulares modernos: menores, portáteis, mais rápidos, com maior capacidade de armazenamento e processamento, com autonomia de bateria e permitindo chamadas de vídeos. O estudo das propriedades dos semicondutores vai além de sua composição química, e envolve a compreensão e manipulação dos átomos que constituem seu arranjo cristalino, em relação à sua disposição espacial e sua simetria. As propriedades físicas desses materiais são estudadas por meio de suas estruturas de bandas, que do ponto de vista teórico são descritas pelo Hamiltoniano da equação de Shrödinger, $H\psi = E\psi$. Hamiltonianos efetivos, construídos por meio do método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, vêm sendo utilizados há algumas décadas e fornecem uma descrição realística das estruturas de bandas, com baixo custo computacional em relação aos métodos de primeiros princípios.(1-2) Esta abordagem permite ajuste de curvas sob dados experimentais para descrição dos *spin-splitting* e fatores-g efetivos. (1-3) A construção desses Hamiltonianos utiliza propriedades de simetria do grupo cristalino que se pretende estudar a partir da teoria de grupos, no entanto, esse processo resulta na dependência de alguns parâmetros. (1,3) O Laboratório de Física Computacional do IFSC desenvolveu e utiliza, em parceria com o QTNano do IQSC, um método que extrai parâmetros por meio de *fitting* das estruturas de bandas previamente calculadas, utilizando teoria de perturbação de Löwdin e termos de massa efetiva que vão além da ordem zero. (1,3) Para uma descrição envolvendo modelos com *gap* indireto (topo da banda de valência e fundo da banda condução não alinhados), ou mesmo quando o *gap* é da ordem do *spin-splitting*, é necessário a inclusão de mais bandas. Uma maneira de abordar esse tipo de problema com soluções realísticas é, a partir das simetrias do sistema, utilizar os termos ímpares responsáveis por uma abertura mais significativa das energias, com a inclusão de vínculos que possibilitem descrever a simetria de inversão espacial no Hamiltoniano. Essa estratégia permitirá uma descrição mais realística levando a uma melhora no *fitting* para determinar parâmetros como a massa efetiva e fatores-g, podendo futuramente ser integrada à abordagem conhecida por *High Throughput in Material Science*. Até o momento, nossos esforços estão voltados para construção de uma *framework* que auxilie no processo de tomada de decisão sobre qual tamanho, quais bandas são mais influentes em cada região e direção da zona de Brillouin, e qual o número de parâmetros do Hamiltoniano é suficiente para uma descrição realística do sistema.

Palavras-chave: Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Hamiltoniano efetivo. Semicondutores.

Agência de fomento: CNPq (140279/2020-2)

Referências:

1 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ parameters. **Semiconductors Science**

and Technology, v. 31, p. 105002-1-105002-10, 2016. DOI. 10.1088/0268-1242/31/10/105002.

2 MARQUARDT, O. *et al.* Multiband k-p model and fitting scheme for *ab initio* based electronic structure parameters for wurtzite GaAs. **Physical Review B**, v. 101, p. 235147-1-235147-12, 2020. DOI. 10.1103/PhysRevB.101.235147.

3 BASTOS, C. M. O. *et al.* A comprehensive study of g-factors, elastic, structural and electronic properties of III-V semiconductors using hybrid-density functional theory. **Journal of Applied Physics**, v. 123, n. 6, p. 065702-1-065702-13, 2018, DOI. 10.1063/1.5018325.

PG196

Topological and transport properties of the Su-Schrieffer-Heeger model

ARAUJO, Ítalo Moreira de; PENTEADO, Poliana Heiffig; EGUES, José Carlos

italo.maraujo@ifsc.usp.br

The Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model was initially introduced to study the physics present on polyacetylene. (1) It was later recognized as the simplest example of a 1D topological insulator. (2) Here we have spinless electrons in a structure characterized by the alternation of weak and strong bonds among sublattices A and B. In this work, we investigate the topological and transport properties of a system described by the SSH model. We analyze the topological aspect of this model by studying its bulk properties and exploring the symmetries of the Hamiltonian, namely, chiral and inversion symmetry. We then obtain the energy spectrum for a finite SSH chain and find zero-energy modes. These modes signal a topological phase transition. We also calculate the conductance of the SSH chain coupled a metallic lead (3) by applying the scattering matrix approach combined with Green's functions and the LandauerBüttiker formalism.

Palavras-chave: SSH. Topological insulator. Chiral symmetry.

Agência de fomento: CAPES (88887.682835/2022-00)

Referências:

1 SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R.; HEEGER, A. J. Solitons in polyacetylene. **Physical Review Letters**, v. 42, p. 1698, 1979.

2 SCHINDLER, F. Dirac equation perspective on higher-order topological insulators. **Journal Applied Physics**, v. 128, n. 22, p. 221102, 2020.

3 CALIFRER, I. J.; PENTEADO, P. H.; EGUES, J. C.; CHEN, W. **Proximity-induced zero-energy states indistinguishable from topological edge states**. 2022. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2205.03331.pdf>. Acesso em: 15 jul. 2022.

PG197

Efeitos toxicológicos das nanopartículas de óxido de Cério (CeO₂) e óxido de Zinco (ZnO) na microalga marinha *Navicula* sp.

TUESTA, Marco Montero; ZUCOLOTTTO, Valtencir

monterotuesta@usp.br

A produção de nanomateriais tem aumentado consideravelmente nos últimos 10 anos, devido às suas propriedades únicas intrínsecas, que incluem uma grande relação área-superfície e alta reatividade. As nanopartículas (NPs) de óxido de Cério e Zinco, por exemplo, têm sido produzidas em larga escala para aplicações como componentes de cerâmica, vidro fotossensível, catalisadores de combustível, filtros solares e tintas. No entanto, Estudos mostraram que as nanopartículas de ZnO, no peixe-zebra geraram danos enzimáticos alterando o equilíbrio antioxidante produzindo espécies reativas de oxigênio. (1) Por sua parte, as NPs de óxido de cério, ao interagir com bactérias e microalgas se ligam a sítios de coordenação de importantes moléculas biológicas, como enzimas e proteínas alterando as funções metabólicas e inibindo a taxa metabólica e a obtenção de nutrientes. Nesse sentido, uma das maiores preocupações da Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico (OCDE) é risco ambiental que esses materiais podem trazer. (2) Embora essas NPs sejam amplamente explorados em diversas áreas da ciência, dados sobre sua toxicidade em microalgas marinhas ainda são escassos. O Objetivo deste estudo é avaliar a toxicidade das NPs de Óxido de Cério e Zinco sobre as microalgas marinha *Navicula* sp. Para isto, foram realizados estudos de estabilidade das NPs no meio de cultura das microalgas, biodisponibilidade, assim como seus efeitos no crescimento e composição bioquímica. A internalização das NPs na microalga marinha *Navicula* sp também foi avaliada. O tempo de avaliação foi de 96 horas levando em consideração as normas da OCDE, 2011. A estabilidade dos nanomateriais foi avaliada a cada 24 horas, tomando como momento inicial a suspensão dos nanomateriais. O tamanho inicial das NPs de CeO₂ e ZnO no meio de cultura das microalgas foi $650,8 \pm 30$ nm e $316,8 \pm 53,93$ nm respectivamente. Para determinar a biodisponibilidade e inibição do crescimento, foram utilizadas concentrações ecologicamente relevantes, portanto, para as NPs de CeO₂ as concentrações determinadas foram 0, 4, 6, 8, 10, 12 mg/L e para as NPs de ZnO foram 0, 1, 2, 3, 4, 5 mg/L. O valor da concentração de inibição do crescimento em 96 h (IC₅₀-96h) para *Navicula* sp exposta as NPs CeO₂ foi de 5,26 mg/L e para as NPs de ZnO foi de 2,91 mg/L. Os valores de IC₅₀ determinados serão utilizados nos experimentos seguintes, os quais são à determinação da análise bioquímica e posterior avaliação da internalização. Nas análises bioquímicas serão avaliadas o conteúdo de carboidratos, lipídios e proteínas totais, bem como a atividade antioxidante da catalase, superóxido dismutase e glutathione peroxidase. Por outro lado, a análise da internalização dos nanomateriais em *Navicula* sp será realizada por microscopia eletrônica de transmissão. Esperamos que os resultados aqui apresentados sirvam de base para uma melhor gestão na fabricação, no uso, comercialização e no descarte dos nanomateriais, de forma que todos esses processos sejam realizados de forma responsável e sustentável. Além disso, também servirá como uma ferramenta importante para os gestores e os membros das entidades governamentais na tomada de decisões no âmbito da gestão ambiental.

Palavras-chave: Nanomateriais. Microalgas. Nanopartículas.

Agência de fomento: CNPq (380989/2021-2)

Referências:

- 1 BRAYNER, R. *et al.* Toxicological impact studies based on Escherichia coli bacteria in ultrafine ZnO nanoparticles colloidal medium. **Nano Letters**, v. 6, p. 866-870, 2006.
- 2 PALMBERG, C.; DERNIS, H.; MIGUET, C. **Nanotechnology**: an overview based on indicators and statistics. Paris: OECD, 2009.

PG198

Avaliação de técnicas ópticas para descontaminação de órgãos sólidos para transplante em modelos in vitro e ex vivo

GAMEZ, Yordania Matos; KURACHI, Cristina; VOLLET FILHO, Jose Dirceu; INADA, Natalia

ymatosg@usp.br

A disponibilidade de órgãos é um fator limitante para o transplante, resultando em altas taxas de mortalidade de pacientes na lista de espera. A infecção de órgãos por microrganismos patogênicos é uma das causas de descarte de órgãos, devido ao alto risco de contaminação do receptor e os consequentes problemas associados. A radiação ultravioleta C e a Terapia Fotodinâmica são modalidades antimicrobianas (1-2) estabelecidas para a inativação de microrganismos patogênicos, e quando combinada com a perfusão ex vivo do órgão pode se tornar uma alternativa para o tratamento de enxertos contaminados. (3) Neste estudo, investigamos a viabilidade do uso da radiação UV-C e a Terapia Fotodinâmica para a descontaminação de órgão sólido em modelos in vitro e ex vivo associados à perfusão em um equipamento de perfusão renal. Diferentes modelos in vitro foram desenvolvidos simulando condições estruturais distintas de adesão bacteriana no interior do modelo e avaliando a contaminação bacteriana remanescente dos materiais, sendo utilizadas membranas metálicas e uma cerâmica porosa como superfícies para a contaminação bacteriana. A linhagem bacteriana *Staphylococcus aureus* foi utilizada nas formas planctônica e em biofilme. Nos modelos in vitro a radiação UV-C de 60 min e fluência $2,09 \text{ J/cm}^2$ promoveu a inativação completa no perfusato circulante de 6 a 7 log (CFU/mL). No entanto, não houve a descontaminação dos materiais. A combinação da radiação UV-C com 500 mg de Oxacilina Sódica no perfusato não foi efetiva para alterar a aderência nem a viabilidade das células bacterianas nos materiais contaminados. A Terapia Fotodinâmica para a descontaminação do Custodiol® circulante com azul de metileno e 660 nm obteve inativação de apenas 1 log (CFU/mL) durante 4 h de irradiação (fluência de 432 J/cm^2). Novamente não foi observada descontaminação relevante dos materiais empregados. Finalmente, foi utilizado um modelo ex vivo de fígado de rato infectado, e os resultados também mostraram contaminação residual de órgãos e até mesmo uma diminuição da eficácia de inativação no perfusato. Os resultados mostram a viabilidade da utilização da radiação UV-C na inativação de *S. aureus* do meio circulante e a relevância do desenvolvimento de métodos alternativos para a desaderência bacteriana ou tratamento antimicrobiano in situ para melhorar a descontaminação de órgãos em combinação com o tratamento UVC do perfusato. O desenvolvimento de testes empregando a Terapia Fotodinâmica (660 nm) na descontaminação do líquido circulante utilizando outros fotossensibilizadores que sejam efetivos com o Custodiol tornaria a utilização de esta técnica uma alternativa viável para a o tratamento de enxertos contaminados.

Palavras-chave: Radiação UV-C. Terapia fotodinâmica. Inativação microbiana.

Agência de fomento: CAPES (ATAc/IFSC13/2017)

Referências:

1 WU, X. *et al.* Ultraviolet blood irradiation: is it time to remember "the cure that time forgot". **Journal**

of **Photochemistry and Photobiology B : biology**, v. 157, p. 89-96, 2016.

2 SOUKOS, N. S.; GOODSON, J. M. Photodynamic therapy in the control of oral biofilms. **Periodontology 2000**, v. 55, n. 1, p. 143-166, 2011.

3 GALASSO, M. *et al.* Inactivating hepatitis C virus in donor lungs using light therapies during normothermic ex vivo lung perfusion. **Nature Communications**, v. 10, n. 1, p. 1-12, 2019.

PG199

Plasmídeos e ambientes genéticos envolvidos na transferência do gene *blaKPC* em bactérias gram-negativas de origem clínica

BORALLI, Camila; PAGANINI, Julian; MENESES, Rodrigo; MATA, Camila da; SCHÜRCH, Anita; PAGANELLI, Fernanda; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha

camila.boralli@usp.br

A resistência aos antibióticos é uma grande ameaça em todo o mundo. Atualmente, os β -lactâmicos são a classe de agentes antibacterianos mais utilizada e agem interrompendo a formação da parede celular bacteriana. Dentre as β -lactamases, as carbapenemases são enzimas com o maior espectro/potencial de degradação dos β -lactâmicos e recebem esse nome por conferirem resistência aos carbapenêmicos. O gene *blaKPC* (*beta-lactamase Klebsiella pneumoniae carbapenemase*) codifica uma serina-carbapenemase que vem sendo descrita em várias Enterobacterales. (1) Esse gene foi descrito, primeiramente, no transposon Tn 4401, ambiente genético ao qual se atribui a mobilidade do gene. Porém, também há relatos deste gene em outros ambientes genéticos, denominados *non-Tn4401 element containing blaKPC* (NTEKPC). (2-3) Essa variedade de ambientes genéticos pode ser encontrada em diferentes plasmídeos e o impacto desta mudança de ambiente genético e de plasmídeo na disseminação deste gene de resistência segue sem maiores elucidacões. Assim, nosso objetivo é analisar bactérias gram-negativas que contenham gene *blaKPC* isoladas de infecções de pacientes hospitalizados para caracterizar seus ambientes genéticos e os plasmídeos que os abrigam. Os isolados deste estudo pertencem a diversas espécies e são provenientes de 4 hospitais do Brasil. Até o momento, 68 das 215 (32%) amostras bacterianas resistentes aos carbapenêmicos estudadas apresentaram o gene *blaKPC* e a presença do Tn 4401 foi identificada em 15% das amostras *blaKPC* positivas (10/68). Em cada hospital observamos frequências diferentes para presença do gene no Tn 4401. Tipamos as amostras *blaKPC* positivas de cada espécie contendo NTEKPC pela macrorrestrição do DNA genômico seguida de Eletroforese em Gel por Campo Pulsado (PFGE), além de quatro outros isolado pertencentes a um surto de *K. pneumoniae* produtora de KPC e NDM – que possuem *blaKPC* em Tn 4401. Selecionamos 52 isolados bacterianos representantes de populações clonais e esses isolados tiveram seus genomas sequenciados pelas tecnologias *Illumina* e *Nanopore* entre eles, BHKPC93 e BHKPC104 – pertencentes ao surto citado. Estudos mais detalhados de BHKPC93 e BHKPC104 mostraram que o gene *blaKPC* se encontrava em Tn 4401b em um plasmídeo conjugativo IncN de 56 kpb e *blaNDM* em um plasmídeo IncC de 102 kpb com outros 5 genes de resistência. Ensaios de conjugação in vitro para *E. coli* J53 resultaram na transferência de *blaKPC* mas não de *blaNDM* com uma taxa de conjugação de aproximadamente 2×10^{-5} transconjugante/receptor, sem alterações no *fitness cost*. A CIM de meropenem/imipenem para BHKPC93 e BHKPC104 foi 128/64 e 256/128 mg/L, respectivamente. Apesar das CIM de meropenem/imipenem para os transconjugantes ser de 2mg/L, considerada sensível pelo BrCAST, houve um incremento substancial da CIM inicial de 0,06 e 0,125 mg/L. Os genomas das demais amostras sequenciadas estão sendo analisadas para caracterização dos plasmídeos e ambientes genéticos. Ao fim deste trabalho, esperamos contribuir para uma melhor compreensão da dinâmica da disseminação da resistência bacteriana aos carbapenêmicos.

Palavras-chave: blaKPC. carbapenemase. Tn4401.

Agência de fomento: CAPES (88882.328750/2019-01)

Referências:

- 1 ANDRADE, L. N.; DARINI, A. L. C. Bacilos gram-negativos produtores de beta-lactamases: que blablabla é esse? **Journal of Infection Control**, v. 6, n. 1, p. 1-10, 2017.
- 2 NAAS, T. *et al.* Genetic structures at origin of acquisition of the β -Lactamase blaKPC gene. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 52, n. 4, p. 1257-1263, 2008.
- 3 CHEN L. *et al.* Carbapenemase-producing *Klebsiella pneumoniae*: molecular and genetic decoding. **Trends in Microbiology**, v. 22, n. 12, p. 686-696, 2014.

PG200

Magnetic order and RKKY interactions in metallic quasicrystals

ARAUJO, Ronaldo do Nascimento; ANDRADE, Eric

ronaldonasaraujo@gmail.com

Motivated by the non-Fermi-liquid behavior observed in quasicrystals and their approximants, (1) we study a simple model for magnetic impurities placed at sites with different local environments coupled by the RKKY interaction. We use the tight-binding model for different sizes of Ammann-Beenker tiling to calculate these interactions. We find that the magnetic interaction strongly depends on the distance between the impurities and the local environment. (2) The spin relaxation rate T_1 decreases with the size of the quasicrystal approximant, as expected from the experimental results. (3) In second, we study Ising spins coupled with RKKY interactions using Monte Carlo simulations. Despite the frustrated interaction, the spins in the octagonal tiling freeze in an antiferromagnetic-like state, but a spin-glass behavior has been found in icosahedral quasicrystals in experiments. (2-3)

Palavras-chave: Quasicrystals. RKKY. Monte Carlo.

Agência de fomento: CAPES (88887.338570/2019-00)

Referências:

- 1 SHECHTMAN, D.; BLECH, D.; GRATIAS, D.; CHAN, J. W. Metallic phase with long-range orientational order and No translational symmetry. **Physical Review Letters**, v. 53, n. 20, p. 1951–1953, 1984.
- 2 THIEM, S.; CHALKER, J. Long-range magnetic order in models for rare-earth quasicrystals. **Physical Review B**, v. 92, n. 22, p. 224409, 2015.
- 3 CABRERA-BAEZ, M.; AVILA, M.; RETTORI, C. Conduction electrons in aperiodic versus periodic structures: An ESR study of quasicrystalline i-Y(Gd)-Cd and its approximant Y(Gd)Cd₆. **Physical Review B**, v. 100, n. 1, p. 014207, 2019.

PG201

Caracterização de minerais brasileiros por difração de raios X, espectroscopia Raman e microsonda eletrônica

LOPES, Gerson; ANDRADE, Marcelo; ATENCIO, Daniel

g.anderson@ifsc.usp.br

A caracterização de minerais brasileiros é fundamental para o desenvolvimento científico, tecnológico e, sobretudo, econômico do país. A partir do conhecimento aprofundado das espécies minerais brasileiras pode-se ampliar, diversificar e tornar mais eficiente a exploração, beneficiamento e uso destes recursos. Contudo, apesar de o Brasil ser um dos países com maior representatividade na produção mineral mundial, o conhecimento científico acerca das espécies minerais brasileiras ainda é incipiente. Apenas 76 espécies minerais brasileiras já foram identificadas (1), um número bastante baixo, considerando as dimensões continentais de nosso país. Esta pesquisa, portanto, visa contribuir com os objetivos do Centro de Caracterização de Espécies Minerais (CCEM), um projeto iniciado em parceria com grupo de Cristalografia do IFSC e que já caracterizou mais de uma dezena de novos minerais. As amostras são adquiridas através da colaboração de nosso grupo com museus, colecionadores, mineradoras e centros de pesquisa em geociências nacionais e internacionais e que já renderam publicações importantes (2). Para esta primeira etapa foram selecionadas amostras minerais do Estado do Amapá, que possui mais de 70 anos de atividade mineradora em escala industrial, representando a maior parcela do PIB, porém com um histórico de atividade garimpeira que remonta ao século XVI. (3) Apesar da importância da mineração para o Amapá, a literatura científica sobre os minerais amapaense é escassa. As amostras são provenientes dos municípios de Ferreira Gomes, Serra do Navio, Pedra Branca do Amapari e Laranjal do Jari e consistem principalmente de minérios de ferro e manganês e caulim. As principais técnicas analíticas empregadas serão a de difração de raios X (DRX) de pó e de monocristal, microsonda eletrônica (EDS e WDS) e espectroscopia Raman, que são fundamentais para a descrição completa de espécies minerais conforme a Associação Mineralógica Internacional (IMA). Como técnicas complementares serão empregadas ainda a espectroscopia dispersiva de raios X acoplada à microscopia eletrônica de varredura (MEV-EDS) e a fluorescência de raios X (FRX), que fornecem informações sobre a composição elementar que são valiosas para a interpretação dos difratogramas de pó e dos espectros Raman. A partir dessas técnicas investigam-se propriedades químicas (como composição, concentração, teor), estruturais (arranjo cristalino, substituições químicas e desordem) e espectroscópicas (interação da radiação com a matéria e propriedades óticas) das amostras. Após a finalização das análises das amostras destas localidades serão aplicadas as mesmas técnicas ao estudo de minerais de outras ocorrências no Brasil. Há grande possibilidade de descoberta de novas espécies minerais.

Palavras-chave: Cristalografia. Mineralogia. Cristaloquímica.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 ATENCIO, D. **Type mineralogy of Brazil**. São Paulo: Instituto de Geociências-USP, 2020.

2 OLIVEIRA, M. J. de (org.). **Diagnóstico do setor mineral do Estado do Amapá**. Macapá: IEPA, 2010.

3 LOPES, G. A. C. *et al.* Roméite-group minerals review: new crystal chemical and Raman data of Fluorcalcioroméite and hydroxycalcioroméite. **Minerals**, v. 11, n. 12, p. 1409, 2021.

PG202

Evolução dos observáveis de um gás quântico aprisionado

MARINO, Áttis Vinícius Martines; MADEIRA, Lucas; BAGNATO, Vanderlei Salvador

attis.marino@gmail.com

A partir de uma simulação computacional de um Condensado de Bose-Einstein (BEC) aprisionado por um potencial harmônico, contendo inicialmente um par de vórtices anti-paralelos duplamente carregados (1), extraiu-se a evolução temporal de uma série de observáveis de interesse. Esses observáveis ajudam a delinear um entendimento mais completo à respeito da evolução do sistema nessas condições, como o surgimento de um regime turbulento excitado pela interação dos vórtices quânticos. A análise da evolução da densidade de momentos e do espectro de energia mostra que a partir de um determinado instante, se estabelece um regime de turbulência caracterizado pela presença de cascatas de energia e de partículas, evidenciadas pela presença de regiões do espectro que obedecem à leis de potência de escalas conhecidas. O regime de turbulência ultraquântico de Vinen, observado em experimentos realizados em hélio líquido e característico de superfluidos, também foi detectado na simulação como resultado da interação dos vórtices. Através da análise direcional das densidades de momentos, nos quais comparam-se os espectros limitados a direções e ângulos sólidos específicos, mostra-se que a isotropia da densidade de momentos é atingida assim que o regime turbulento se inicia, à despeito da anisotropia inicial da geometria do sistema. Além disso, realizando-se uma separação dos espectros de energia cinética em suas componentes rotacionais e compressivas, observa-se que a evolução do sistema desencadeia o transporte de energia compressiva para a rotacional. Extraíndo-se da simulação os fluxos de energia e partículas através das classes de momentos (2), obtém-se um comportamento oscilatório característico do modo de respiração do sistema. Em particular, o fluxo de partículas apresenta uma região positiva e praticamente constante no intervalo de momentos no qual se identifica o regime de turbulência de Vinen, indicando a presença de uma cascata direta de partículas.

Palavras-chave: Fluidos quânticos. Turbulência quântica. Condensados de Bose-Einstein.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

- 1 CIDRIM, A. *et al.* Vinen turbulence via the decay of multi-charged vortices in trapped atomic Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 96, n. 2, p. 023617, 2017.
- 2 MARINO, Á.V.M. *et al.* Momentum distribution of Vinen turbulence in trapped atomic Bose-Einstein condensates. **European Physical Journal Special Topics**, v. 230, p. 809–812, 2021.

PG203

Análise Evolutiva e Estrutural de Genes Associados ao Diabetes Mellitus Tipo 2

MOTA, Diogo; SETUBAL, João; JORGE, Alexander

diogomaciel@usp.br

Diabetes Mellitus (DM) é um grupo de doenças metabólicas caracterizadas por hiperglicemia resultante de defeitos na secreção de insulina, ação de insulina ou ambos os casos. A maioria dos casos registrados de DM encontra-se em duas categorias: Diabetes Mellitus Tipo 1 (DM1), caracterizada por uma deficiência absoluta de insulina, provocada por um processo patológico autoimune nas ilhotas pancreáticas e nos marcadores genéticos; e Tipo 2 (DM2), uma combinação de resistência à ação, com uma resposta ineficiente à secreção da insulina, o DM2 está presente entre 90~95% dos casos da doença. (1) Deve-se notar, que o DM2 é uma doença multifatorial onde as contribuições individuais de cada mutação tendem a ser moderadas. Isso sugere que a maioria das mutações não irá gerar um cenário catastrófico, como perda de atividade de uma proteína ou completa desestruturação de um gene. De fato, devido à alta prevalência dos alelos relacionados ao DM2 pressupõe-se que durante a evolução da espécie humana estes apresentariam caráter positivo ou próximo de neutro. A manifestação do DM2 é dependente de alelos mutantes em múltiplos loci gênicos, onde a interação entre eles e o ambiente serão determinantes na manifestação da síndrome. Essa alta prevalência do DM2 em populações humanas representa um enigma evolutivo, visto que seria esperado que mutações deletérias fossem eliminadas pela seleção natural. (2) Com os avanços em genômica, após o término do Projeto Genoma Humano, tivemos um crescente conhecimento de como single nucleotide polymorphisms (SNPs) afetam a saúde humana, além de reduzir, de forma significativa, os custos para sequenciamentos de genomas inteiros, facilitando o desenvolvimento da medicina genética individualizada. Estudos de Associação Ampla do Genoma (Genome-Wide Association Studies - GWAS) permitiram a descoberta de variações genéticas comuns, contribuindo para características normais e patológicas, e respostas a medicamentos clínicos, mas reconhecer os alvos precisos dessas associações é agora o maior desafio. Diversos GWAS associados ao DM2 foram realizados e permitiram a identificação de um grande número de loci relacionados com uma maior suscetibilidade ao fenótipo da doença. Atualmente, há, pelo menos, 537 sinais distintos de associação ao DM2, atribuídos a 325 loci. (3) O acúmulo de evidências adicionais, fornecendo indícios que mudanças no padrão de splicing são um fator importante na manifestação do DM2, pode ser uma importante contribuição para o entendimento da doença. Seria relevante, também, entender se a alta prevalência de SNPs associadas ao DM2 estaria associada à modificação de padrões de expressão em genes que seriam mais permissivos a este tipo de mudança ao longo da evolução, o que explicaria a baixa pressão seletiva associada as SNPs.

Palavras-chave: Diabetes mellitus. Single nucleotide polymorphism. Genome-wide association studies.

Agência de fomento: FAPESP (2018/11907-0)

Referências:

- 1 AMERICAN DIABETES ASSOCIATION. Classification and diagnosis of diabetes: standards of medical care in diabetes - 2019. **Diabetes Care**, v. 42, S. 1, p. S13-S28, 2019.
- 2 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, 23 jan. 2013.
- 3 MAHAJAN, A. *et al.* Fine-mapping type 2 diabetes loci to single-variant resolution using high-density imputation and islet-specific epigenome maps. **Nature Genetics**, v. 50, n. 11, p.1505-1513, 8 out. 2018.

PG204

Platinum micromachining using femtosecond laser pulses

ROCHA, Luiz Eduardo Raphael da; MENDONÇA, Cleber; TASSO, Kelly

luiz.eduardo.rocha@usp.br

Material deposition in microscale has several applications, from microelectronics and integrated optics to the production of biological devices. Direct Laser Writing (DLW) techniques interest in micromachining have grown considerably in the past few years due to its ability to print functional materials, such as metals. (1) Usually, DLW techniques include advantages such as high resolution, processing time, control of deposition size and thickness, while maintaining the material properties. The Laser Induced Forward Transfer (LIFT) is a DLW technique, whose principle is to transfer energy from the laser pulse to the sample, ejecting material droplets from the region where the laser beam is focalized. The nonlinear light-matter interaction generates nonlinear ionization in the focal volume, creating a plasma, which will cause the thermal stress and dissipation and, therefore, the optical breakdown and the nanoparticles deposition. The thermal dissipation takes place in nanoseconds, which is slower than the pulse duration (fs), so the thermal dissipation is confined in the focal volume, causing less damage in the areas nearby. The metals micromachining has been drawing attention due to its applications. Platinum micromachined structures are used to produce sensors, because of the material stability in different conditions and other applications. In this work, it has been studied the Pt micromachining using femtosecond laser LIFT, in order to find the best conditions to deposit Platinum nanoparticles (PtNP's). For this, the zero damage method and the incubation effect were used. After that, we've evaluated the micromachining of structures for different applications. The depositions were made in 1st and 2nd harmonic, centered at 1030 nm (μ J range pulse energies) and 515 nm (nJ range pulse energies), respectively, and 1 to 100 kHz of repetition rates. It was possible to verify that the optimum conditions to micromachine PtNP's, for 1st harmonic, is using pulse energies around 4 μ J and repetition rate around 1 kHz, and 2nd harmonic, is using pulse energies around 12 nJ and repetition rate around 5 kHz. Additionally, the SEM images revealed the controlled and localized deposition of PtNP's.

Palavras-chave: Micromachining. Platinum. LIFT.

Agência de fomento: Sem auxílio

Referências:

1 ESROM, H. *et al.* New approach of a laser-induced forward transfer for deposition of patterned thin metal films, **Applied Surface Science**, v. 86, n.1-4, p. 202–207, 1995.

PG205

Nanomedicine applied to acute myeloid leukemia treatment via Macrophages CD44 receptors

ANTONIO, Luana; RIBOVSKI, Laís; ZUCOLOTTTO, Valtencir

luana.antonio@usp.br

Leukemic cells recruit macrophages and induce pro-leukemic phenotypes. Known as leukemic-associated macrophages (LAMs), the macrophages promote cancer progression and drug resistance, correlated with poor prognosis. (1) Nevertheless, LAMs intrinsic targeting to cancer cells also allows them to act as transporters of nanocarriers (NCs). We proposed to explore the binding between hyaluronic acid (HA) and CD44, a receptor that mediates cell-cell and cell-matrix interaction, to transport a nanotherapeutic to the leukemic cells. (2-3) To assess the macrophages' ability to effectively deliver NCs via CD44-targeting to acute myeloid leukemia (AML) cells, we studied their interaction with NCs in co-cultures of macrophages and AML cells. Three configurations of NCs based on poly (lactic acid-co-glycolic acid) (PLGA) were evaluated: i) NCs modified with polyethylene glycol (PEG), to evade the immune system; ii) NCs modified with HA, CD44-HA binding and iii) non-modified NCs (carboxyl moiety), which diameters are 179 ± 60 , 141 ± 28 and 136 ± 25 nm, respectively. Macrophages previously exposed to NCs were co-cultured with AML cells and the uptake and delivery of NCs to AML cells were analyzed by flow cytometry. PLGA-PEG-HA NCs were more internalized by pro-leukemic macrophages than non-induced or LPS-induced phenotypes, indicating specificity and in agreement with the upregulation of CD44 in pro-leukemic macrophages. Initial viability assays indicated that PLGA-PEG-HA NCs loaded with arsenic trioxide increase leukemic cell death as a result of the macrophages acting as bearer of the NCs.

Palavras-chave: Drug delivery. Macrophages. Leukemia.

Agência de fomento: FAPESP (2020/02386-7)

Referências:

- 1 LI, Y. *et al.* The role of tumor-associated macrophages in leukemia. **Acta Haematologica**. v.143, n.2, p.112–117, 2020. DOI:10.1159/000500315.
- 2 RIOS DE LA ROSA, J. M. *et al.* The CD44-mediated uptake of Hyaluronic acid-based carriers in macrophages. **Advances Health Care Materials** v. 6, n.4, p.1–11, 2017. DOI:/10.1002/adhm.201601012.
- 3 XIA, Y. *et al.* Engineering macrophages for cancer immunotherapy and drug delivery. **Advanced Materials**. v. 32, n.40, p.1–20, 2020. DOI:/10.1002/adma.202002054.

Índice de Autores

A	
ABEGAO, L.	150
ABREU, F. M. O.	376
ACOSTA, I.	68
AFONSO, R.	149, 193
AGUIAR, A. C. A.	233
AGUIAR, A. C. C.	215
AGUIAR, I.	416
AHMAD, A.	233
AKIYAMA, J.	79
ALCARAZ, F.	400
ALMEIDA, I. C.	287
ALMEIDA, J. M. P.	221
ALMEIDA, L. B.	355
ALVARENGA, J. P. V.	392
ALVES, A. H. R.	364
ALVES, F. ..	108, 111, 134, 187, 370, 397, 401
AMARAL, M.	269
AMBROSIO, A.	376
AMBROSIO, A. L. B.	327, 336
AMORIM, M. R.	249
ANDRADE, E.	81, 429
ANDRADE, E. C.	287
ANDRADE, L. N. S.	232
ANDRADE, M.	363, 430
ANDRADE, M. B.	179
ANDRADE, M. J. D.	214
ANTONIO, L.	436
ANTUNES, C. A.	256
ARAI, M. S.	119
ARAUJO, A. P.	338
ARAUJO, A. P. U.	247, 395
ARAUJO, F.	132
ARAUJO, H. S.	178
ARAUJO, I. M.	422
ARAUJO, R. N.	429
ARBELETCHÉ, L. B.	157
ARMIJOS, M. A. M.	263, 332
ARRUDA, H. F.	36
ARRUDA, J. F. Z.	57
ASNIS, Y.	253
ATENCIO, D.	430
AUDI, G.	357
AYALA, E. T. P.	122, 305, 397
AZEVEDO, E. R.	120, 348
AZZAR, P. R. S.	102
B	
BACHELARD, R.	166
BACHELARD, R. P. M.	102
BAGNATO, V. S. .	78, 111, 134, 156, 174, 203, 209, 223, 243, 263, 289, 305, 323, 332, 334, 335, 366, 370, 381, 432
BALTAZAR, M. F. M.	288
BARBEDO, A.	69
BARBOSA, C. S.	215, 233, 249
BARBOSA, M. G.	160
BARENGHI, C. F.	223
BARRA, A.	158
BARROS, L.	289
BARTHABURU, M. P.	416
BECKER, M. I.	336
BELLINI, B. S.	355
BELLINI, N. K.	124
BENATTI, A.	36
BERETA, S.	175
BERGAMASCHI, T.	281
BERLINCK, R. G. S.	249
BERNARDES, D. F.	348
BERNARDES, E. S.	281
BERNARDEZ, A. S. S. C. A.	76, 115
BERNARDI, J. C.	110, 331
BIRAL, E.	181

BISPO JUNIOR, A. G.	145, 146	CARVALHO, I.	111
BISTAFFA, M. J.	345, 351	CASTILHO, P. C. M.	334, 335
BLANCO, K. C.	174	CASTILHO, R. F.	156, 203
BOCCHI, J. H. C.	258	CASTILHO, R. R.	372
BOITO, D.	155, 171	CASTRO NETO, J. C. 33, 105, 218, 261, 280, 374	
BOITO, D. R.	70, 278	CASTRO, B. S.	137
BONAGAMBA, T.	52, 104, 106	CAVINI, I. A.	197, 338
BONAGAMBA, T. J.	85, 301	CENTURION, H. A.	353
BONI, L. ... 65, 79, 83, 94, 150, 153, 161, 163, 226, 272		CERQUEIRA, M. C.	405
BORALLI, C.	427	CERRI, R.	364
BOSSOLAN, N. R. S.	379	CESSER, G.	93
BOUFLER, R. C.	58	CHACCA, C. W. T.	334, 335
BRADTMULLER, H.	170	CHEN, J.	206
BRAMBILLA, G. V.	119	COCCA, L. Z.	150, 153, 161, 163, 272
BRIHAYE, Y.	337	COELHO, F.	274
BRITO, F.	165	COMIN, C. H.	35, 45
BRITO, F. B.	184, 282	CONSOLE, F.	337
BRUNO, O. M. . 145, 146, 200, 321, 359, 392, 414		CORREA, A.	276
BRUZAO, G. L.	61	CORREA, B. C.	78
BUOZZI, M. T.	309	CORREA, T.	108
BURTOLOSO, A. C.	233	CORREIA, D. S.	418
BUZZÁ, H.	117	CORRER, G. I.	316
BUZZA, H. H.	206	CORTEZ, A.	176
C		COSTA, C.	381
CABRAL-MIRANDA, G.	251	COSTA, F. R. F.	47
CABREJOS, D. A. L.	197, 245, 315	COSTA, G. F.	307
CALDERÓN, G. L.	220, 242	COSTA, J. P. C.	142
CAMARGO, A.	347	COSTA, L. F.	36, 167, 386, 413
CAMARGO, A. S.	119	COSTA, M. S. F.	288
CAMARGO, A. S. S.	74	COSTA, R.	150
CAMARGO, G. M.	403	COURTEILLE, P. W.	269, 412
CAMARGO, I. L. B. C.	51, 71, 427	COUTO, F.	236
CAMARGO, M. A.	318	CROCE, J. N.	83
CAMPOS, N.	52	CRUZ, S. T.	134
CANAL, G.	253	CUCCHIERI, A.	171
CANDURI, F.	126	CUMPALLI, A. A.	305
CAPELO, G.	55	D	
CAPETTI, C.	293	D'ALMEIDA, C. P.	307
CAPOBIANCO, R.	350	DANTAS, L.	194
CARDOSO, M.	208	DELFINO, M.	108
CARDOSO, M. R.	326	DIAS, L. D.	112
CARDOSO, V. M. O.	128, 345, 351	DIAS, P. G. S.	269
CARVALHO, F.	132, 307	DIAS, S. M. G.	376
CARVALHO, F. A.	39	DIAZ, R. S.	251
		DINIZ, G.	341

DINIZ, P. S.	71
DOLCI, I.	143, 204
DOMINGUES, A. V.	410
DOMINGUES, G. S.	167
DONATO, M. H. F.	248
DOURADO, L. A.	383
DOURADO, R.	190
DRINKO, A.	378

E

ECKERT, H.	130, 170, 189
EGUES, J. C.	190, 422
ELLENA, J. A.	140, 296, 375
ELLENA, M.	336
ENSUNCHO, L.	170

F

FABRIS, V.	34
FAGIANI, J. V.	286
FARIA, C.	366, 381
FARIA, G.	137, 168
FARIA, G. C.	258, 303, 344
FARIA, W.	347
FARIAS, K. M.	334, 335
FARRO, E. G. S.	406
FASSIO, A. V.	267
FEITOSA, P.	307
FERMIANO, B.	41
FERNANDES, A.	197
FERNANDES, J. C.	334
FERNANDES, R.	143, 204
FERNANDEZ, D. R.	208, 326
FERNANDEZ, L. A. V.	395
FERNANDEZ, M. F.	269
FERNANDEZ, V. C.	336
FERREIRA, A. G. A.	85, 106
FERREIRA, C. H. G.	89, 295
FERREIRA, J. F.	379
FERREIRA, L. A.	325
FERREIRA, L. M. B.	128
FERREIRA, N. N.	288
FERREIRA, P.	221
FERREIRA, P. C. A.	312
FIRMINO, P. P.	296
FLORENTINO, B. R.	73
FLOREZ, Y. A.	344
FONSECA, M.	36
FONTANA, C. R.	172

FONTANARI, J. F.	73, 87, 230, 254
FRAIZ, M. O.	58
FRANÇA, D.	94
FRANÇA, G.	412
FREIRE, M.	267
FRITSCH, A. R.	263, 332
FURTADO, A. A.	315
FURUTA, R. H. M.	413

G

GALAIN, I.	416
GALANTUCCI, L.	223
GAMEZ, Y. M.	425
GARCIA, M.	132
GARCIA, R.	83, 226
GARRATT, R. C.	152, 197, 245, 315, 320, 395
GASPAR, P. M.	334, 335
GASQUES, L. R.	93
GILER, A. G. D.	260
GIROTO, V.	105
GODOY, A.	204, 276
GODOY, M. O.	204, 267, 276
GOENAGA, L.	323
GOETTEMES, E. I.	149
GOMES, J. I. A. B.	71
GOMES, N. D.	208, 212
GOMES, Y. H. F.	130
GOMEZ, J. C. C.	245
GONÇALVES, D.	96, 318
GONÇALVES, I.	370
GONÇALVES, P.	153
GONÇALVES, R. V.	40, 54, 90, 310, 353, 408
GONÇALVES, T.	347
GREGORIO, G. M.	250
GUIDO, R.	204, 215
GUIDO, R. C.	393
GUIDO, R. V. C.	233, 249, 267, 276
GUIMARAES, F. E.	187, 218, 251, 358, 403
GUIMARAES, F. E. G.	136, 174, 361
GUNTHER, F. S.	340
GUTIERREZ, E. D. M.	334, 335
GUTIERREZ, R. F.	210

H

HABERMANN, G.	291
HARTMANN, B.	250, 314, 337, 350
HENN, E. A. L.	91, 240, 292, 363
HENRIQUE, R.	100

HERNANDES, A. C.	221	LIMA, I. A.	243
HERRERA, J. B. V.	408	LIMA, V. P. G.	300
HIGUITA, G. D. G.	137	LIMBERGER, J.	79, 150
HILARIO, A.	147	LODI, T. A.	115
HUAMAN, J. L. C.	139, 220, 309	LONDON, C. Y. M.	171
HUERTA, H. M.	372	LOPES, G.	430
I		LOPES, L. K. B. C.	112
IGLESIAS, B. A.	83	LOPES, R. G.	366
IKEDA, H.	189	LUCHINI, G.	325
ILIDIO, P.	364	LUGINIESKI, M.	168
INACIO, A. C. C.	67	LUNDGREN, P. U.	71
INADA, N.	156, 203, 323, 366, 425	M	
INAGAKI, J. H. M.	165	MACHADO, L. A.	223
ISSA, M.	124	MACIEL, M. D.	184
J		MADEIRA, L.	103, 223, 332, 432
JASINEVICIUS, G. O.	206	MAGNANI, B. F.	212
JESUS, V. D.	115	MAGNANI, P. H. N.	269
JOAQUIM, D. T.	321	MAGNO, G. F.	295
JOHELAVICIUS, K.	390	MAIA, G.	96
JORGE, A.	433	MALAVAZZI, H.	325
JUCOVSKI, A.	327	MALUF, S.	233
JUSTINO, L. R.	239	MAMANI, E. C.	247
K		MAMPRIM, J. G.	46
KALUSCHE, G.	180	MANSUR, L. M.	70
KAMIZAKI, L. P.	188	MARASSI, A. G.	104
KASSAB, G.	209	MARCASSA, L. G.	208, 212, 326
KIS, A.	202	MARCELINO, G. B. S.	40
KLAHOLZ, B.	152	MARCOLAN, J.	264
KONDO, J. D. M.	208, 212	MAREGA JUNIOR, E.	202, 220, 242
KUL, J. O.	106	MAREGA, G. M.	202
KURACHI, C. ...	117, 187, 206, 209, 323, 358, 401, 425	MARIANO, M. S.	87
KURAMOTO, C.	307	MARINHO, F. A.	374
L		MARINO, Á. V. M.	432
LAISSENER, B. S.	238	MARQUES, M. J. A. M.	187
LANG, R. G.	383	MARTINELLI, L. P.	206
LAZARO, C. G.	252	MARTINELLI, T.	252
LEAL JUNIOR, J. M.	180, 405	MARTINEZ, V. J.	240
LEGUIA, V. C. G.	336	MARTINS, E.	201
LEITE, A. E. T.	128	MARTINS, T. T.	188
LEITE, C. M.	128	MASS, E. B.	274
LEMES, M. F. S.	202	MASSINO, E. G.	192
LENZARINI, M.	64	MASSON, R.	270
LEONI, R. F.	234	MATA, C.	427
		MATERON, E. M.	96, 228
		MATTOS, V. S.	218
		MAZZIERO, M. L.	133

MEDEIROS, A. I.	366	NASCIMENTO, A. S. 158, 194, 197, 210, 217, 333, 406	
MENDES, G. R.	249	NASCIMENTO, C. S.	65
MENDES, T.	171, 405	NOGUEIRA, G.	155
MENDONÇA, C. R. 41, 67, 98, 114, 150, 153, 161, 163, 172, 195, 236, 272, 284, 309, 435		NOGUEIRA, G. T.	33
MENDONÇA, D. C.	152	NOGUEIRA, V.	267
MENESES, R.	427	NOGUEIRA, V. H. R.	62
MENEZES, J. C. E.	141, 142	NOSKE, G. D.	143, 204, 276
MERENDA, J. V.	200	NUNES, P.	375
MERIZIO, L. G.	115	O	
MESSADDEQ, Y.	220	ODA, Y. S.	261
MEZZACAPPO, N. F.	156, 203	OITICICA, P. R. A.	298
MIDDELETON-SPENCER, H.	223	OLIANI, F.	278
MILITAO, L.	140	OLIVA, G.	143, 204, 276
MIRALHAS, V. S.	81	OLIVEIRA JUNIOR, M.	122
MIRANDA, M.	251, 403	OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	228, 298, 390
MIRANDA, P. B.	340	OLIVEIRA NETO, F.	225
MIRANDA, R. R.	128	OLIVEIRA, A. B.	172
MISOGUTI, L.	68, 150, 368	OLIVEIRA, B. L.	126
MOMESSO, D. C.	343	OLIVEIRA, C.	231
MONTES, R. S.	398	OLIVEIRA, C. J.	99
MORAES, J. Q. R.	172	OLIVEIRA, C. R.	249
MORAZOTTI, N. A. C.	169	OLIVEIRA, D. C.	124
MOREIRA, N. A.	166	OLIVEIRA, E. L.	52, 301
MOREIRA, N. M.	249	OLIVEIRA, G. S.	62
MORENO, L.	217, 333	OLIVEIRA, L. N.	64, 341
MORENO, N. S.	288, 416	OLIVEIRA, L. O.	280
MORENO, Y.	252	OLIVEIRA, N. P.	307
MORIYAMA, L. T.	206, 300	OROZCO, A. D. G.	263, 332
MOTA, D.	433	OSPINA, O. M.	69, 161, 163
MOTTA, O.	186	OTUKA, A. J. G.	172, 236
MOURA, I.	215	P	
MOURA, I. R.	233	PAGANELLI, F.	427
MOUSSA, M.	225, 360	PAGANINI, J.	427
MOUSSA, M. H. Y.	178, 411	PAIVA, F. F.	99, 100, 234, 393
MOYSES, R. M.	368	PANDOLFI, F.	215
MUNDO, T. L.	44	PARRA, I.	195
MUNIZ, S. R.	188, 232, 248, 410	PASCHOAL, A. M.	234
MUNOZ, S. M. M.	336	PATINO, C. P. B.	381
N		PAULA, T.	157
NADDEO, N. N. F.	128	PAULI, I. G.	42
NAKADA, P. J. T.	401	PEDRIZ, I. S.	128
NAKANE, S.	189	PEGAS, J. V.	89
NAPOLITANO, R. J.	169, 357	PELLEGRINI, V. O. A.	176, 293
		PELOSI, A. G.	69, 153, 161, 163, 272
		PENA, A. B.	266

PENTEADO, P. H.	141, 142, 422
PEREIRA, G. G. D.	258
PEREIRA, H. D. M.	197, 245, 315
PEREIRA, V. A. M. C.	284
PEREIRA-ALVES, F.	301
PEREZ, A. S.	156, 203
PEREZ, S. M. L.	78
PEREZ, V. P.	71
PESSENDA, L.	221
PESSOA JUNIOR, C.	412
PETROVSKII, S.	146
PIGUEL, S.	161, 163
PIMENTA, J. V. A.	58
PINTO, A. P. A.	395
PINTO, D. O. S.	378
PINTO, D. S.	149, 193, 291
PINTO, F.	251, 403
PINTO, R. D.	355
PINTO, V. P.	33
POLIKARPOV, I.	176, 293, 384, 388, 401
PORTUGAL, R. V.	152
PRADO, A. P. G. A.	136, 361
PRATAVIEIRA, S.	108, 111, 122, 132, 134, 176, 256, 305, 307, 361, 370, 397

Q

QUADROS, T.	76
QUEIROZ, A. E.	179
QUEIROZ, G. E. T.	393
QUEIROZ, M. X.	176
QUEIROZ, S. B.	71
QUITIBA, J.	329

R

RABELO, L. G.	310, 353
RAFAEL, L. D. D.	49
RAMIREZ-SARMIENTO, C. A.	315
RAMOS, L.	400
RAMOS, M. E. M.	77
RAMPONI, T. C.	314
REIS, I.	213
REIS, R.	386
RIBAS, L. C.	414
RIBEIRO, L. V.	331
RIBOVSKI, L.	436
RICALDI, J. Y. A. C.	220
RICOMINI FILHO, A. P.	176
RIVERA, V. A. G.	220

RIVERO, D.	412
ROCHA, L.	411
ROCHA, L. E. R.	435
ROCHA, T. S.	320
RODRIGUES, F. A.	252
ROSA, H.	197
ROSA, M. B.	74
ROSA, W. S.	310, 408
ROSSI, G. B.	58
ROSSI, P. F.	58
RUSSOWSKY, D.	274

S

SAB, S.	263
SADRAEIAN, M.	251
SALA, F. A.	320
SALADINO, G. C. R.	338
SALCEDO, E. G. I.	334, 335
SALDIVA, P.	361
SAMANIEGO, L. V. B.	384
SANTARELLI, M. A. C.	175, 183, 223, 289
SANTIAGO, P.	296
SANTIAGO, P. H. O.	375
SANTILLAN, J. A. V.	245, 315
SANTOS, B. N.	292
SANTOS, C. H. D.	150, 272
SANTOS, F. E. A.	181
SANTOS, G.	37
SANTOS, J.	276
SANTOS, J. G. O.	141
SANTOS, J. P. C.	359
SANTOS, K. F.	228
SANTOS, M. L.	189
SANTOS, N. C.	35, 45
SANTOS, N. V.	361
SANTOS-FILHO, L.	71
SCHÜRCH, A.	427
SCIPIONE, L.	215
SCIUTI, L.	150
SELLIN, D.	85
SETUBAL, J.	433
SILVA, C. C.	266
SILVA, D.	153
SILVA, D. L.	163
SILVA, E.	399
SILVA, E. S.	104, 143, 204
SILVA, J.	110

SILVA, L.	199, 360
SILVA, L. R. S.	71
SILVA, M. B.	58
SILVA, P.	180
SILVA, T. S.	274
SILVEIRA-ALVES JUNIOR, E.	153
SIPAHI, G.	42
SIPAHI, G. M.	133, 330, 420
SIQUEIRA, A. H.	330
SIQUEIRA, C.	239
SIQUEIRA, C. M.	286
SIQUEIRA, J. P.	272
SIQUEIRA, W. C. A.	280
SIQUEIRA-NETO, N. S.	230
SIQUEIRA-SANTOS, E. S.	203
SKULLERUD, J.	180
SOARES, J. M.	174
SOARES-PINTO, D.	295
SOARES-PINTO, D. O.	312, 316
SOLCIA, G.	100, 234
SOUZA, A. N. G. D. D.	176, 293, 384
SOUZA, D. B.	299
SOUZA, M. S.	340
SOUZA FILHO, L. V.	44, 46, 192, 231, 286
SOUZA, G.	215, 267, 358, 381
SOUZA, G. E.	233
SOUZA, M. O.	122, 397
SOUZA, M. S.	47, 49, 274
SOUZA, R. F. S.	303
SOUZA, V.	157, 260, 383
STERMAN, R.	345, 351
SUZUKI, I. L.	288

T

TÓRTURA, H. A.	254
TAGUCHI, F. M. C.	280
TANIMOTO, C.	376
TANNUS, A.	264, 398, 418
TASSO, K.	41, 435
TEIXEIRA, R. C.	269, 412
TELLES, G. D.	263
THIEMANN, O. H.	124, 320, 364
TOME, A. J.	117
TOMISHIYO, G.	183
TONHON, R.	60, 103

TORINI, L.	71
TORRES, B. B. M.	303
TORRES, M. L.	208, 326
TOVAR, J. S. D.	209
TRANZIL, V. T. R.	98
TREBBI, B.	120
TUESTA, M. M.	423

V

VACILOTTO, M. M.	388
VALENTE, D. M.	149
VALVERDE, J. V.	69, 153, 161, 163
VANZELLA, D. A. T.	89, 160
VASCONCELOS, L.	119
VAZ, B. A.	279
VECCHI, M.	260
VERAS, M. M.	361
VERCESI, A. E.	156, 203
VIANA, A. E. M.	77, 199, 213, 214, 239, 299, 343
VIANA, J. V. S.	139
VICENTE, M. L. F.	136, 361
VIDOR, C. R.	282
VIEIRA, E. V. M.	114
VIEIRA, G. N.	90
VILLEFORT, G.	51
VIVAS, M. G.	272
VOLLET FILHO, J. D.	156, 323, 425

W

WANDERLEY, A. B.	420
-----------------------	-----

Y

YAMASSHIRO, A.	115
YAMAZAKI, H.	189
YASUOKA, F. M. M.	33, 105
YELISETTY, K.	91

Z

ZAMBON, G. C.	191
ZAMPAULO, L. G. T.	54
ZANINI, C.	215
ZHENG, G.	206
ZIELINSKI, K. M. C.	414
ZUCOLOTTO, V.	110, 128, 288, 329, 331, 345, 351, 399, 416, 423, 436

REALIZAÇÃO

SIFSC12

APOIO



PATROCÍNIO

THORLABS