

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos

XIV Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos

Livro de Resumos da Pós-Graduação

São Carlos  
2024

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

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

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

Texto em português.

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

ISSN: 2965-7679

73

## Predição da geração de oxigênio singleto por meio da excitação por sonoluminescência

PRATAVIEIRA, Sebastião<sup>1</sup>; ANTUNES, Camila Aparecida<sup>1</sup>; AYALA, Erika Toneth Ponce<sup>1</sup>

camila.antunes@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos – USP

A terapia sonodinâmica (TSD) é uma abordagem minimamente invasiva que pode ser utilizada para eliminar células cancerígenas, combinando ultrassom (US) de baixa intensidade, um fármaco sonoativado e oxigênio molecular afim de produzir espécies reativas de oxigênio (EROs) e, consequentemente, induzir a morte celular por necrose ou apoptose. (1) Quando o US se propaga em um meio, pequenas bolhas de gás podem se formar e começar a oscilar, um fenômeno chamado cavitação. Se a pressão acústica for alta o suficiente, as bolhas oscilantes implodirão, gerando um flash de luz, conhecido como sonoluminescência (SL). (2) Este evento serve como um reator químico e pode ser responsável pela geração de oxigênio singleto, uma ROS que é danosa às células. Apesar de a ocorrência de SL ser conhecida, não há consenso sobre sua contribuição exata para a geração de ROS. Esta pesquisa visa prever matematicamente a quantidade de oxigênio singleto gerado pela excitação da SL e o papel que ela desempenha na geração dessa EROs sob a influência do US. Para isso, foi criada uma rotina no software MATLAB para calcular o número de moléculas de oxigênio singleto geradas por SL, considerando diferentes moléculas comumente usadas como fotossensibilizadores (FS), como protoporfirina IX, azul de metileno, curcumina, clorina e6, verde de indocianina e acridina laranja. Os dados sobre o espectro da sonoluminescência foram obtidos da literatura. (2) A intensidade absorvida por cada FS foi obtida pela solução da lei de Beer-Lambert. A partir do rendimento quântico de oxigênio singleto, conhecido para cada molécula devido à irradiação de luz, foi obtido o número de oxigênio singleto gerado pela SL. Para verificar a precisão do modelo, os resultados foram comparados com os dados disponíveis na literatura. (3) Os resultados mostram que, apesar de haver uma certa diferença entre os valores obtidos teoricamente e experimentalmente para todas as moléculas analisadas, o modelo foi capaz de prever a geração de oxigênio singleto devido à SL. As diferenças nos resultados podem indicar a necessidade de se obter novos espectros de SL para cada molécula, uma medição mais precisa do oxigênio singleto, e a possível existência de outras reações químicas que não foram consideradas no modelo atual. Em suma, as moléculas utilizadas como sensibilizadores indicam a importância da molécula considerada para geração de SL, que é responsável pela formação de espécies de oxigênio singleto na SDT e, consequentemente, na eficácia dessa terapia.

**Palavras-chave:** Produção de oxigênio singleto; Sonoluminescência; Terapia sonodinâmica.

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

### Referências:

1 WANG, S. *et al.* Beyond photo: Xdynamic therapies in fighting cancer. **Advanced Materials**, v. 33, n. 25, p. 2007488, June 2021. DOI: 10.1002/adma.202007488.

2 GIUNTINI, F. *et al.* Insight into ultrasound-mediated reactive oxygen species generation by various metal-porphyrin complexes. **Free Radical Biology and Medicine**, v. 121, p. 190-201, 2018. DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2018.05.002.

3 ZHAN, M. *et al.* Dual-cascade activatable nanopotentiators reshaping adenosine metabolism for sono-chemodynamic-immunotherapy of deep tumors. **Advanced Science**, v. 10, n. 10, p. 2207200, Apr. 2023. DOI: 10.1002/advs.202207200.