



SIFSC⁵

SEMANA INTEGRADA DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

LIVRO DE RESUMOS

**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**V Semana Integrada do Instituto de Física
de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2015**

Universidade de São Paulo

Reitor Marco Antonio Zago
Vice-Reitor Vahan Agopyan

Instituto de Física de São Carlos

Diretor Tito José Bonagamba
Vice-Diretor Osvaldo Novaes de Oliveira Junior

Normalização e revisão – SBI/IFSC

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

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(5. : 28 set. - 02 out. : 2015: São Carlos, SP.)
Livro de resumos / Organizado por Krissia Z.
Zawadzki [et al]. São Carlos: IFSC, 2015.
414 p.

Texto em português.

1. Física. I. Zawadzki, K. II. Aurichio, V. H.
III. Canella, G. A. IV. Título.

CDD 530

ISBN - 978-85-61958-11-4



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 5

Coordenadores

Prof. Dr. Tito José Bonagamba

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

Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

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

Prof. Dr. Luiz Gustavo Marcassa

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

Comissão Organizadora

Akina Karen Yoshioka

Anderson Thiago Maruyama Nascimento

Carla Tatiana Hebling Vieira

Carolina Lia Cerne

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Guilherme Arantes Canella

Graziele Izalina Vasconcelos

Humberto Ribeiro de Souza

Karin Talisin Targas

Krissia de Zawadzki

Mariana Lopes Garcia

Vicente Silva Mattos

Victor Silva Tona de Abranches

Vinicius Henrique Aurichio



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Carta de apresentação

A Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos (SIFSC) é um evento organizado por estudantes de graduação e pós-graduação do Instituto de Física de São Carlos que tem por objetivo integrar a comunidade IFSC por meio de um conjunto de atividades acadêmicas e culturais. Todas as tarefas - que incluem a escolha e o convite de palestrantes, auxílio na captação de recursos, divulgação, coordenação de atividades e diálogo com servidores técnico-administrativos - são realizadas pelos alunos membros da comissão organizadora.

Neste ano, em sua quinta edição, o público esperado para a SIFSC 5 supera o número 600, incluindo estudantes nos diversos níveis, além de cerca de 100 participantes que atuam como avaliadores, palestrantes e representantes de empresas. A SIFSC 5 mantém o espírito multidisciplinar ativo no IFSC, oferecendo uma programação científica de alto nível aos estudantes dos cursos de graduação em Física, Física Computacional e Ciências Físicas e Biomoleculares e alunos de pós-graduação do IFSC-USP.

Buscamos explicitar as diversas parcerias que o IFSC-USP tem com o setor privado. Abrimos espaço para que produtos, muitas vezes desenvolvidos em colaborações entre o instituto e empresas de alta tecnologia, sejam apresentados durante o evento. Também buscamos ampliar os horizontes de nosso público ao convidar empresas que empregam egressos de nosso instituto para ministrar palestras durante a SIFSC5.

A apresentação dos trabalhos científicos desenvolvidos no IFSC-USP - Workshop de Iniciação Científica e Workshop de Pós-Graduação - ocorrerá de forma unificada ao SIICUSP e à apresentação dos trabalhos da X SELIC. A apresentação de numerosos pôsteres de diversas áreas proporcionará aos participantes um ambiente variado para discussão científica e para integração de alunos, professores e pesquisadores. Os trabalhos científicos de destaque receberão o Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas. Criado em 2011 por iniciativa da comissão organizadora com apoio da diretoria, o prêmio, que prestigia trabalhos científicos desenvolvidos no IFSC-USP, chega à sua quinta edição com 109 concorrentes.

Além da agenda científica, o evento também conta com uma programação cultural intensa e diversificada, oferecendo aos alunos do IFSC-USP a oportunidade de mostrarem que suas habilidades artísticas podem ser tão grandes quanto seus méritos acadêmicos.

A Comissão Organizadora agradece o total apoio da diretoria do IFSC-USP, às Comissões de Graduação e Pós-Graduação. Agradece ainda, ao apoio dos servidores da Biblioteca, aos técnico-administrativos, à assessoria de comunicação, bem como aos palestrantes, empresas convidadas, avaliadores e à comunidade do IFSC-USP pela participação no evento.

Comissão Organizadora da SIFSC 5



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Caracterização espectroscópica de vidros e vitrocerâmicas oxifluoretos dopados com terras raras como potenciais meios ativos para lasers ALMEIDA FILHO, F. P.; CAMARGO, A. S. S.	29
IC2 - Análise da interação proteica entre CrNIP7 e CrSBDS de <i>Chlamydomonas reinhardtii</i> BARRA, A. L. C.; GUTIERREZ, R. F.; ARAÚJO, A. P. U.....	30
IC3 - Estudo estrutural entre o receptor PPAR gama e pteroilglutamatos BENTO, G. I. V.; NASCIMENTO, A. S.	32
IC4 - Caracterização das interações proteína-proteína da U5-200k spliceossomal em <i>Trypanosoma brucei</i> BORALLI, C. M. dos S; SILVA, I.R.; SILVA, M. T. A. da; THIEMANN, O. H.....	34
IC5 - Development of a genossensor for sickle-cell disease trait determination BRAMORSKI, C.; BRAZACA, L. C.; JANEGITZ, B. C.; ZUCOLOTTI, V.....	36
IC6 - Polímeros: aplicações e impactos no meio ambiente sob a perspectiva de alunos do Ensino Fundamental CAMPELO, R.; COLNAGO, N. A. S.; CORDEIRO, A. P. M.; BORTOLETTO-SANTOS, R. C.; SOARES, S. R. B.; MASCARENHAS, Y. P.	38
IC7 - Estudo do complexo polimérico <i>PEGD</i> – <i>LiClO₄</i> através de espectroscopia e relaxometria por RMN CARDOSO, C; BONAGAMBA, T. J; ÁLVAREZ, D. J.....	40
IC8 - Efeitos das condições de cultivo sobre crescimento e produção de biosurfactante por bactéria halofílica oriunda de reservatório de petróleo CARVALHO, K. F.; CORRÊA, T.; BOSSOLAN, N. R. S.	42
IC9 - Estudos e aplicações dos módulos de ligação à carboidratos das hidrolases de glicosídeos na otimização da despolimerização de biomassa CURTOLO, F.; BERNARDES, A.; POLIKARPOV, I.....	44

IC10 - Simulação computacional de um relógio atômico com átomos frios DE SOUSA, G.; MUNIZ, S. R.	46
IC11 - Triagem biológica de candidatos a inibidores da enzima enolase de plasmodium falciparum DE SOUZA, J. O.; BUENO, R. V.; MALUF, F. V.; DE SOUSA, L. R. F.; GARCIA, C. R. S.....	47
IC12 - Estudos biofísicos da septina SmSEPT10G de Schistosoma mansoni na presença forchlorfenuron, composto que afeta a dinâmica de septinas FONTES, M. G.; ZERAIK, A. E.; DE MARCO, R.....	49
IC13 - Cerâmicas condutoras de prótons à base de $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,52}R_{0,3}O_{9-\delta}$ ($R = Y, Nd, Sm, Gd$): preparação e propriedade FRANCISCO, L. H.; RODRIGUES, J. E. F. S.; HERNANDES, A. C.	51
IC14 - A sinergia na engenharia de ecossistemas FRANCO, C.; FONTANARI, J. F.	53
IC15 - Estudo da mineralogia do pegmatito Volta Grande - Nazareno, MG GARCIA, G. S.; ANDRADE, M. B. de	55
IC16 - Nature of science as seen by nobel prize laureates LICIO, J. G.; SILVA, C. C.....	56
IC17 - Development and characterization of multifunctional nanoparticles using liposomal coating and transferrin for use in nanomedicine LINS, P.; ZUCOLOTTI, V.; CANCELO, J.....	57
IC18 - Portas lógicas quânticas para sistemas de óptica linear MARTINS, G. F.; BRITO, F.	58
IC19 - Análise de leite por refletância difusa - sondaLeite MATTOS, V. S.; MELO, W. L. B.	60
IC20 - Análise estrutural da enzima superóxido dismutase de Xantomonas citri MENDONÇA, D. C.; GOTO, L. S.	62
IC21 - Quantum gas machine for dysprosium atoms MIOTTI, M. P.; TONIN, Y. R.; HENN, E. A. L.	64
IC22 - Campo magnético para sintonização de ressonâncias de Feshbach em amostras ultrafrias: testes e caracterização MONTEIRO, V. M.; CASTILHO, P. C. M.; PEÑAFIEL, E. P.; VIVANCO, F. A. J.; BAGNATO, V. S.; FARIAS, K. M.	65

IC23 - Síntese, caracterização e aplicação de hidrogéis de quitosana-polianilina OTA, R. T.; FERNANDES, E. G. R.	66
IC24 - Estudo cristalográfico de minerais da região de Volta Grande (MG) QUEIROZ, A. A. A. E.; ANDRADE, M. B.; ELLENA, J.	68
IC25 - Caracterização biofísica e estrutural da hidrolase de glicosídeo da família GH32 de <i>Bacillus licheniformis</i> ROCHA, T. S.; LIMA, M. Z. T.; MUNIZ, J. R. C.	70
IC26 - Técnicas de regularização no efeito Casimir SANTI, N. S. M.; CUCCHIERI, A.	72
IC27 - Influence of frequency distribution on the discontinuous phase transition in networks of Kuramoto oscillators SANTOS, E. R.; PERON, T. K. D. M.; RODRIGUES, F. A.	73
IC28 - Expressão, purificação da enzima UCK1 da via de salvação de pirimidinas do parasita <i>Schistosoma mansoni</i> SARRO, G. V.; ROMANELLO, L.; TORINI, J. R.; BIRD, L.; NETTESHIP, J.; OWENS, R.; REDDIVARI, Y.; BRANDÃO NETO, J.; PEREIRA, H. M.	75
IC29 - Elaboração e caracterização no estado sólido de novas formas sólidas de Inibidores Seletivos de Recaptação de Serotonina SOLER, T. de O.; SILVA, C. C. P. da; CARVALHO JUNIOR, P. de S.	77
IC30 - Caracterização biofísica da proteína Cwc21 de <i>Trypanosoma brucei</i> SOUZA, G. E. de; SILVA, I. R.; SILVA, M. T. A. da; THIEMANN, O. H.	79
IC31 - Tipagem do elemento SCCmec de amostras de <i>Staphylococcus aureus</i> resistentes à metilina (MRSA) isolados em São Carlos UEMURA, E. R.; OKADO, J. B.; CAMARGO, I. L. B. C.	81
IC32 - Análise da distribuição de íons ao redor de proteínas globulares em solução eletrolítica usando técnicas de Dinâmica Molecular VISCARDI, L. A. M.; CÂMARA, A. S.; HORJALES, E.	83
IC33 - Análise dos efeitos da fototerapia em modelo de membrana corioalantóica de ovos de galinha ZANGIROLAMI, A. C.; BUZZA, H. de H.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	84

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - Complex network dynamics for authorship recognition AKIMUSHKIN, C.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.....	86
PG2 - Images from stomata networks and geometric measures shows physiologic intelligence during environmental adaptation in 4 monocot species from commelinids subclade: a new evolutionary paradigm. ALMEIDA FILHO, H. A.; MARTINEZ, O. B.	87
PG3 - Waveguide fabrication in L-threonine crystals using ultrashort laser pulses ALMEIDA, G. F. B. de; RODRIGUES JUNIOR, J. J; MENDONÇA, C. R.....	89
PG4 - Estudo do recobrimento biológico de nanossuperfícies por modelagem computacional: aplicação no desenvolvimento de imunonanossensores AMARANTE, A. M.; OLIVEIRA, G. S.; IERICH, J. C. M.; MORAES, A. S.; FREITAS, L. C. G.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; LEITE, F. L.	90
PG5 - Acompanhamento da resposta vascular e do recrescimento de tumor de pele após associação de terapia fotodinâmica e radioterapia ANDRADE, C. T.; KANICK, S. C.; MARRA, K.; GUNN, J.; ANDREZZI, J.; SAMKOE, K. S.; BAGNATO, V. S.; POGUE, B.; KURACHI, C.	92
PG6 - Desenvolvimento de redes proteicas bidimensionais automontáveis ANDRADE, G. I. B. de; NAVARRO, M. V. de A. S.	94
PG7 - Estudos estruturais por espalhamento a baixo ângulo (SAXS) e cristalografia de raios-X de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios ARAUJO, E. A. de; GOUVEA, I. E.; POLIKARPOV, I.	96
PG8 - Análise de modelos de reciprocidade indireta em teoria dos jogos evolucionária MAIA, L. P.; ARAUJO, G. D.....	98
PG9 - Localização de estados quânticos em armadilhas iônicas ARAUJO, H.S.; MOUSSA, M.H.Y.....	100

PG10 - Seleção de bactérias termo-halofílicas produtoras de biossurfactantes a partir de rocha de reservatório de petróleo	
ARGENTIN, M. N.; BOSSOLAN, N. R. S.	101
PG11 - High-performance and high-order numerical methods for 2D Navier-Stokes equations	
AURICHIO, V. H.; CUCCHIERI, A.; OLIVEIRA, M. L. B.	103
PG12 - Conversão do Poli(Cloreto de tetrahidrotiofeno de xililideno)(PTHT) em Poli(P-fenileno vinileno) (PPV) via irradiação com pulsos de femtossegundos	
AVILA SALAS, O. I.; MENDONÇA, C. R.	104
PG13 - Estudos estruturais e funcionais das proteínas envolvidas na síntese da parede de ácidos teicóicos em Staphylococcus aureus	
AZEVEDO, E. C.; NASCIMENTO, A. S.	105
PG14 - Detecção de comunidades em redes complexas através de caminhadas auto-excludentes	
BAGNATO, G. G.; RONQUI, J. R. F.; TRAVIESO, G.	107
PG15 - A novel nanofiber/ Ag nanocapsules system for application as bactericidal materials for medical application	
BALLESTEROS, C. A. S.; ZUCOLOTTI, V.; CORREA, D.	109
PG16 - Estimação de parâmetros em sistemas quânticos	
BARRETO, D. L.; SOARES-PINTO, D. O.	110
PG17 - Efeito da adição de dopantes e da rota de síntese nas propriedades do composto CaTiO_3	
BARROS, K. L. P.; MASTELARO, V. R.	111
PG18 - Comparative study between 8×8 and 6×6 k-p Hamiltonian: the case of GaAs zinc blende	
BASTOS, C. M. O.; SABINO, F.; FARIA JUNIOR, P. E.; CAMPOS, T.; SILVA, J. L. F. da; SIPAHLI, G. M.	112
PG19 - O uso de abordagens histórica e investigativa na reelaboração de roteiros sobre calor e alavancas da Experimentoteca do CDCC-USP	
BATISTA, R. F. M.; SILVA, C. C.	114
PG20 - Selenium metabolism and biosynthesis of selenocysteine in Naegleria gruberi	
BELLINI, N. K.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	116
PG21 - Band Gap engineering in the chalcogenide semiconductors $\text{Cs}_2\text{M}^{II}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$: the role of hybrid density functional theory	
BESSE, R.; SABINO, F. P.; SILVA, J. L. F.	118

PG22 - O limite termodinâmico do modelo de Axelrod unidimensional de dois estados BIRAL, E. J. P.; FONTANARI, J. F.	120
PG23 - Caracterização estrutural e funcional da enzima XaFold: planejamento de inibidores da biossíntese de folatos BUNEO, R. V.; MALUF, F. V.; GUIDO, R. V. C.	122
PG24 - Avaliação da terapia fotodinâmica e o uso da fluorescência em um modelo tumoral em membrana corioalantóica BUZZA, H. H.; ZANGIROLAMI, A. C.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	124
PG25 - Study and development of spherical harmonics based methods for ligand similarity analysis CAIRES, F. R.; MONTALVÃO, R. W.	126
PG26 - Expressão heteróloga de enzima arabinofuranosidase de Thielavia terrestris envolvida na degradação da biomassa lignocelulósica CAMARGO, S.; MUNIZ, J. R. C.; POLIKARPOV, I.	127
PG27 - Photodynamic therapy on hairless mice photoaged skin: single and fractionated illumination CAMPOS, C. P.; JORGE, A. E.; D'ALMEIDA, C. P.; KURACHI, C.	129
PG28 - Edge conduction in HgTe/CdTe quantum wells in the presence of perpendicular magnetic fields CANDIDO, D. R.; PENTEADO, P. H.; EGUES, J. C.	131
PG29 - De estados quase-estacionários a fases multi-absorventes em um modelo de crescimento unidimensional. CARVAJAL JARA, D. A.; ALCARAZ, F. C.	132
PG30 - Desenvolvimento e caracterização de novas formas sólidas de insumos farmacêuticos ativos de ação antidepressiva CARVALHO JUNIOR, P. S.; ELLENA, J.	134
PG31 - Modeling hippocampal bursting using a lognormal recurrent network CARVALHO, M. M.; FUKAI, T.; MAIA, L. P.	135
PG32 - The potassium system for producing a two-species Bose-Einstein Condensate ^{23}Na-^{41}K with tunable interactions CASTILHO, P. C. M.; PEÑAFIEL, E. P.; MERCADO-GUTIERREZ, E.; FARIAS, K. M.; BAGNATO, V. S.	136
PG33 - Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J.	137

PG34 - Peptídeo beta-amiloide estudado por Ressonância Magnética Nuclear de alta pressão	
CAVINI, I. A.; KALBITZER, H. R.; MUNTE, C. E.	138
PG35 - Transição de fase quântica em um sistema 2D com rede de vórtices	
CHAVIGURI, J. R. H.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.	140
PG36 - Estudos sobre relações de flutuações quânticas: definição de trabalho quântico e relações de novos observáveis	
CHERUBIM, C. F.; BRITO, F.	141
PG37 - Septina de Chlamydomonas reinhardtii: estudos com foco em sua expressão e função	
CIOL, H.; PINTO, A. A.; ZERAIK, A. E.; MACEDO, J. N.; DEMARCO, R.; ARAUJO, A. P. U. de	142
PG38 - Caracterização espectroscópica da dinâmica populacional de moléculas de Ftalocianina de Zinco (ZnPc)	
COCCA, L. H. Z.; DE BONI, L.	143
PG39 - Remote shimming coil controller over HTTP	
COELHO, F. B.; DIAS, D. M.; PIZETTA, D. C.; VIDOTO, E. L. G.; MARTINS, M. J.; TANNUS, A.	144
PG40 - Síntese e caracterização dos compostos $Sr_{1-x}Cu_xTiO_3$ e $SrTi_{1-x}Cu_xO_3$ aplicados a catálise da reação de deslocamento gás-água	
COLETTA, V. C.; MARCOS, F. C. F.; NOGUEIRA, F. G. E.; BERNARDI, M. I. B.; MICHALOWICZ, A.; GONÇALVES, R. V.; ASSAF, E. M.; MASTELARO, V. R.	146
PG41 - Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares	
COMIN, C. H.; COSTA, L. da F.	148
PG42 - Implementation of parallel imaging using phased array and sample arrayed coils	
CONSALTER, D.; PAPOTI, D.; VIDOTO, E.; TANNUS, A.	149
PG43 - Detection of tumor cells using folic acid modified extended gate field-effect transistors	
CORREIA, A. R.; VIEIRA, N. C. S.; ZUCOLOTTI, V.	150
PG44 - Non-Markovian quantum dynamics	
COSTA FILHO, J. I.; SOARES-PINTO, D. O.	152
PG45 - Fusing Majorana modes within a quantum dot	
CRUS, A. R.; PENTEADO, P. H.; VERNEK, E.; EGUES, J. C.	153

PG46 - Evolution of microstructure and molecular dynamics of Poly(3-ethylhexylthiophene) probed by Nuclear Magnetic Resonance	
CUNHA, G. P.; AZÊVEDO, E. R.; DUONG, D. T.; FARIA, G. C.	154
PG47 - Obtenção de estrutura cristalográfica por difração de raio-X do regulador transcricional de <i>Enterococcus faecalis</i> ElrR.	
DE GROOTE, M. C. R.; CAMARGO, I.; REPOILA, F.; SERRA, P.; HORJALES, E.	155
PG48 - Engenharia de interações para obtenção de estados não-clássicos	
DE MORAES NETO, G. D.; TEIZEN, V. F.	156
PG49 - Study of two photon absorption of organic compounds through the Z-Scan technique	
DIPOLD, J.; MELO, R.; FONSECA, R. D.; SIMAS, A. M.; DE BONI, L.; MENDONÇA, C. R.	157
PG50 - Sensores ópticos baseados na reflexão interna	
DOMENEGUETI, J. F. M.; OLIVEIRA, A. R.; ZÍLIO, S. C.	158
PG51 - Comparative analysis of bones with complex networks	
DORO NETO, C.; FONTOURA COSTA, L. da.	159
PG52 - Residue coevolution and protein folding predictions	
DOS SANTOS, R. N.; MORCOS, F.; JANA, B.; ANDRICOPULO, A. D.; ONUCHIC, J. N.	160
PG53 - Lieb-Robinson bounds and superradiance in ultracold atomic clouds	
ESPIRITO SANTO, T. S.; BACHELARD, R. P. M.	161
PG54 - Structure and function studies of an endo-polygalacturonase from the Grass bacillus, <i>Bacillus licheniformis</i>.	
EVANGELISTA, D. E.; POLIKARPOV, I.	162
PG55 - Spatio-spectral mapping method in multispectral images and their application in plant tissues.	
FALVO, M.; BRUNO, O. M.	164
PG56 - High-frequency polarization oscillations in spin lasers	
FARIA JUNIOR, P. E.; XU, G.; LEE, J.; GERHARDT, N. C.; SIPAHI, G. M.; ZUTIC, I.	165
PG57 - Distribuição de dose limiar e suas causas e consequências em terapia fotodinâmica	
FARIA, C. M. G.; INADA, N. I.; BAGNATO, V.S.	166
PG58 - Gold nanoparticles enhanced electrochemical signal in Polyethylene terephthalate/gold electrodes	
FARIA, H. A. M.; ZUCOLOTTI, V.	167

PG59 - Busca de moldes estruturais para a engenharia de funções catalíticas FARRO, E. S.; GARRATT, R. C.; NASCIMENTO, A. S.	168
PG60 - Proteínas MEGs de <i>S. mansoni</i> : um estudo estrutural, funcional e de interação com proteínas e células humanas. FELIZATTI, A. P.; DeMARCO, R.....	170
PG61 - Escherichia coli Selenocysteine specific Elongation factor to (SelB) and Seryl-tRNA synthetase (SerRS) interaction with tRNA^{Sec} FERNADES, A. de F.; SERRÃO, V. H. B.; BASSO, L. G. M.; CRUSCA JUNIOR, E.; THIEMANN, O. H.....	172
PG62 - Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores multi-core FERREIRA, F.; TRAVIESO, G.; RUGGIERO, C. A.	174
PG63 - Experimental and theoretical investigation of two-photon absorption in branched molecular systems FONSECA, R. D.; VIVAS, M. G.; SILVA, D. L.; DE BONI, L.; MENDONÇA, C. R.	176
PG64 - Medidas de refletância difusa para o aprimoramento da dosimetria para fototerapias FORTUNATO, T. C.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S.; MORIYAMA, L. T.	177
PG65 - Estudo das propriedades físico-químicas do plasma para quantificação de carbono em solos usando espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser FRANCO, M. A. M.; MARANGONI, B. S.; MILORI, D. M. B. P.; VILLAS BOAS, P. R.	178
PG66 - Dependência não linear observada na amplitude do modo quadrupolar de um condensado de Bose-Einstein FRITISCH, A. R.; TAVARES, P. E. S.; VIVANCO, F. A. J.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S.	180
PG67 - Computational studies on Plasmodium falciparum N-Myristoyltransferase enzyme and its inhibitors as antimalarial candidates GARCIA, M. L.; GUIDO, R. V. C.	182
PG68 - Critical exponents of the XX spin-1/2 chain under correlated disorder GETELINA, J. C.; HOYOS, J. A.	184
PG69 - Development of a nonlinear optical microscopy by rotation of elliptical polarization GOMES, J. A. C.; MISOGUTI, L.	185
PG70 - Two-body Förster resonances in Rydberg states GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G.	186

PG71 - Sistema de localização de linfonodo sentinela com a utilização de fluorescência de campo amplo.	
GOVONE, A. B.; GÓMEZ-GARCIA, P. A.; ROSA, R. G. T.; CAPUZZO, R. C.; CARVALHO, A. L.; MAGALHÃES, D. V.; KURACHI, C.	188
PG72 - Study of wave-mixing processes in gases in the extreme ultraviolet spectrum with ultrashort pulses	
GUALBERTO, T.; MISOGUTI, L.	190
PG73 - Algoritmo online para detecção da posição de peixes elétricos	
GUARIENTO, R. T.; PINTO, R. D.	191
PG74 - Coupling light into doped polymeric microstructures by means of fiber tapers	
HENRIQUE, F. R.; MENDONÇA, C. R.	192
PG75 - Approaching the allosteric mechanism of MosR with computational methods.	
CAMARA, A.S.; HORJALES REBOREDO, E.	194
PG76 - Non-conventional processing of $CaCu_3Ti_4O_{12}$ ceramics: Laser and Field-assisted flash sintering.	
JESUS, L. M.; SILVA, R. S.; M'PEKOJ.-C.	196
PG77 - Pattern recognition framework: patterns and pseudo-randomness in complex systems	
JUSTO, M. J. M.; BRUNO, O. M.	197
PG78 - Discovery and development of a cosmetic active for skin oil control	
KATEKAWA, E.; GUIDO, R. V. C.	199
PG79 - Estudos sobre o limite de detecção em amostras de solo amazônico por LIBS sob aspecto de diferentes comprimentos de onda	
KRUGER, A. L.; NICOLODELLI, G.; MILORI, D. M. P. B.	201
PG80 - Dissecting the interactions of human galectin-4 and carbohydrates	
KUMAGAI, P. S.; NONATO, M. C.; DIAS-BARUFFI, M.; COSTA-FILHO, A. J.	203
PG81 - Astroparticle tests of Lorentz invariance violation	
LANG, R. G.; SOUZA, V, de	205
PG82 - Interação não canônica entre septinas: os complexos de SEPT3 (grupo I) e septinas do grupo II	
LANZONI, P.; GARRATT, R. C.	207

PG83 - Experimentos históricos no ensino de ciências - Ole Roemer e a velocidade da luz	
LAPORTE, R. S.; SILVA, C. C.	209
PG84 - Estudos de otimização de sinergismo entre enzimas hidrolíticas e oxidativas de diversas origens fúngicas para a preparação de coquetéis enzimáticos	
LEITE, A. E. T.; GODOY, M. O.; KADOWAKI, M. A. S.; POLIKARPOV, I.; AZEVEDO, E. R.	210
PG85 - Optimization of photosensitizer delivery with nanostructures	
LEITE, I. S.; ZUCOLOTTI, V.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M.	212
PG86 - Especificidade na montagem de filamentos de Septinas: o caso da interface G entre SEPT5 e SEPT8	
LEONARDO, D. A.; LANZONI, P.; MACEDO, J. N.; CRUSCA, E. J.; GARRATT, R. C.	214
PG87 - Functional characterization of Trypanosoma brucei spliceosomal protein U5-15K	
LIMA, A. L.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	216
PG88 - Estudos estruturais e cinéticos de enzimas alvo de Xanthomonas albilineans para o desenvolvimento de novos candidatos a agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar	
LIMA, G.M.A.; GUIDO, R.V.C.	218
PG89 - Functional and structural studies of a fructosyltransferase from Lactobacillus gasseri for industrial applications	
LIMA, M. Z. T.; POLIKARPOV, I.; MUNIZ, J. R. C.	220
PG90 - Injeção de ruído estocástico em sistemas quânticos abertos	
LIMA, R. B. B.; SOARES-PINTO, D. O.	222
PG91 - Planejamento e otimização de novos moduladores da proteína tubulina com propriedades antitumorais	
MAGALHÃES, L. G.; ANDRICOPULO, A. D.	223
PG92 - Development and application of high-resolution x-ray imaging techniques for morphological characterization of microfossils	
MALDANIS, L.; GALANTE, D.	225
PG93 - Nanomateriais teranósticos aplicados à problemática do câncer e estudos de toxicidade	
MARANGONI, V. S.; CANCELO, J.; BANKSON, J.; HALAS, N. J.; ZUCOLOTTI, V.	226
PG94 - Protocolos de imagem por ressonância magnética para análise da morfologia interna de sementes de soja	
MARASSI, A. G.; GOMES JUNIOR, F. G.; TANNÚS, A.	228

PG95 - Avaliação hepática utilizando ressonância magnética: validação do método para quantificação de gordura	
MARQUES, M. R. H.; PAIVA, F. F.....	230
PG96 - Desigualdades de Bell: uma conexão com a Teoria de Jogos Bayesianos	
MARTINELLI, T.; SOARES-PINTO, D. O.....	232
PG97 - Análises da influência dos domínios carboxi-terminais das septinas na interação septina-septina	
MARTINS, C. S.; MACEDO, J. N. A.; ARAUJO, A. P. U. de.....	234
PG98 - Emaranhamento em sistemas óptico-mecânicos	
MASCHIO, E. H. M.; DUARTE, O.....	236
PG99 - Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco <i>Gymnotus carapo</i>	
MATIAS, P.; SLAETS, J. F. W.....	237
PG100 - Modelos in silico preditivos nos estudos de permeabilidade	
MATOS, K. S.; ANDRICOPULO, A. D.....	238
PG101 - Caracterização estrutural e funcional de FleQ: um fator de transcrição que regula formação de flagelo e biofilme.	
MATSUYAMA, B. Y.; KRASTEVA, P. V.; BARAQUET, C.; HARWOOD, C. S.; SONDERMANN, H.; NAVARRO, M. V. A. S.....	240
PG102 - Spatial and temporal localization of light in two dimensions	
MAXIMO, C.E.; PIOVELLA, N.; COURTEILLE, Ph. W.; KAISER, R.; BACHELARD, R.....	242
PG103 - Estudos de metatranscriptômica: identificação e caracterização de novas enzimas com potencial na hidrólise de ligações glicosídicas	
MELLO, B. L.; POLIKARPOV, I.....	244
PG104 - DNA encapsulation for antisense gene therapy	
MELO, C. C.; ZUCOLOTTI, V.; BERNARDI, J. C.	245
PG105 - Exploring the selectivity of metal ions in the active site of superoxide dismutase enzyme using site-directed mutagenesis	
MENDONZA, E.; GARRATT, R.; PENNER-HAHN, J. E.....	246
PG106 - Busca e caracterização de inibidores da enzima diadenilato ciclase de <i>Staphylococcus aureus</i>	
MENEGHELLO, R.; NAVARRO, M. V. A. S.....	248

PG107 - Remoção de ruídos de origem biológica em espectroscopia por ressonância magnética através de filtros baseados em transformadas wavelet	
MENEZES, L. P.; PAIVA, F. F.	249
PG108 - Isothermal compressibility and thermal coefficient for a trapped Bose gas across the phase transition	
MERCADO-GUTIERREZ, E.; CASTILHO, P.C.M.; PEDROZO-PENAFIEL, E.; FARIAS, K.M.; BAGNATO, V.S.	250
PG109 - Estudo da correlação estrutura-função da única di-adenilato ciclase de <i>Staphylococcus aureus</i> resistente à metilina (MRSA) - um novo alvo farmacológico.	
MESQUITA, N. C. M. R.; MENEGHELLO, R.; BASSOS, L. G. M.; NAVARRO, M. V. A. S.	251
PG110 - Spontaneous symmetry breaking: Monte Carlo study comparing Metropolis and worm algorithm	
MIGLORIA, A.; MENDES, T.	253
PG111 - Influence of the laser pulse width on nonlinear refractive index of organic solvents measured by nonlinear ellipse rotation	
MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L.	254
PG112 - Evolução temporal de uma quase-partícula	
MIKUNI, V. M.; OLIVEIRA, L. N.	256
PG113 - Efeito bioestimulador do LED de baixa potência na produção de anticorpos monoclonais	
MION, W.; SOUZA, A. V. G.; OLIVEIRA, J. C. V.; GOLIM, M. A.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S.; DEFFUNE, E.; GUIMARÃES, F. E. G.	257
PG114 - Estudo da interação de zeínas com membrana celular utilizando microscopia confocal	
MIRANDA, M. M. P.; GUIMARÃES, F. E. G.	259
PG115 - Hydrolytic and transfructosylating activity of a Beta - Fructofuranosidase from <i>Bifidobacterium adolescentis</i> ATCC 15703	
MONSALVE-MERA, A.; LIMA, M.; MUNIZ, J.R.C.; POLIKARPOV, I.	260
PG116 - Efeito da dimerização do peptídeo antimicrobiano Aureína 1.2 em sua atividade biológica avaliado por monocamadas de Langmuir	
MONTANHA, E. A.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; NOBRE-PAVINATTO, T. M.; LORENZÓN, E. N.; CILLI, E. M.	261
PG117 - Uso e proposta de uma técnica em ressonância magnética nuclear para estudar a migração de moléculas de um fluido num meio poroso	
MONTRAZI, E. T.; D'EURYDICE, M. N.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J.	262

PG118 - Biophysical characterization of the 1-Delta-Pyrroline-5-Carboxylate Dehydrogenase from Trypanosoma cruzi	
MORAES, A. R.; MANTILLA, B. S. Mantilla; MARTIL, D.E.; SILBER, A. M.; THIEMANN, O. H.	264
PG119 - Sequências de pulsos no estado estacionário para caracterização rápida de produtos em baixa resolução	
MORAES, T. B.; DANIELI, E.; BLUMICH, B.; COLNAGO, L. A.	266
PG120 - Produção e estudos estruturais de heterocomplexos de septinas	
MORAIS, S. T. B.; ARAÚJO, A. P. U.	267
PG121 - Pulchellin isoforms: endocytosis and cell transport	
MOREIRA, H. H. T.; LOPES, J. L.; LUND, A. B.; SANDVIG, K.; ARAÚJO, A. P. U.	268
PG122 - Coherent interference between light scattered by cold strontium sample and reflected by an dielectric surface	
MORIYA, P. H.; SHIOZAKI, R. F.; TEIXEIRA, R. C.; COURTEILLE, Ph. W.	269
PG123 - Metal-insulator-semiconductor capacitors based on P3HT-PVP for biosensing applications	
MOURA, M. A.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	270
PG124 - Identificação e estudos moleculares, bioquímicos e estruturais de enzimas termofílicas do fungo Thielavia terrestris cultivado em bagaço de cana-de-açúcar	
MULINARI, E. J.; SEGATO, F.; MUNIZ, J. R. C.; POLIKARPOV, I.	271
PG125 - LiBELa: um método híbrido baseado na estrutura do ligante e receptor para docagem molecular	
MUNIZ, H. dos S.; NASCIMENTO, A. S.	272
PG126 - Functional and structural studies of Bacillus licheniformis carboxylesterases and its potential in the transformation of plant biomass	
NAKAMURA, A. M.; POLIKARPOV, I.; NASCIMENTO, A. S.	274
PG127 - Aproximação de densidade local explorando a solução Bethe-Ansatz do modelo de Hubbard e a conexão adiabática	
NARDI, L. M. C.; OLIVEIRA, L. N.	275
PG128 - Chiral spin-orbital liquid with nodal lines	
NARTORI, W. M. H.; PEREIRA, R. G.; MIRANDA, E.	276
PG129 - Fluorescence lifetime spectroscopy for evaluation of photoaging process at sun exposed and non-exposed skin	
NOGUEIRA, M. S.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.	278

PG130 - High prevalence of linezolid and tigecycline non-susceptibility among CC5 MRSA in a southeastern Brazilian hospital	
OKADO, J. B.; UEMURA, E. R.; BOGNI, S. C.; FREGOLENTE, F. A.; MATTOS, V.; CAMARGO, I. L. B. da C.	280
PG131 - Hamiltoniano intensity dependent na teoria do laser	
OLIVEIRA NETO, F.; MOUSSA, M. H. Y.; TEIZEN, V. F.	282
PG132 - Descoberta e planejamento de novos agentes antibacterianos candidatos a agroquímicos para a escaldadura das folhas	
OLIVEIRA, A. A.; GUIDO, R. V. C.	283
PG133 - Refratômetro diferencial para medida simultânea de Brix e sacarose	
OLIVEIRA, A. R.; DOMENEGUETI, J. F. M.; ZÍLIO, S. C.	284
PG134 - Development and testing of the prototype of multifunctional autoclave	
OLIVEIRA, B. P. de; BLANCO, K. C.; BAGNATO, V. S.	285
PG135 - Fluid dynamics in reservoir rocks: a computational physics approach to understand NMR data	
OLIVEIRA, E. L.; TREVISAN, W. A.; SANTOS, B. C.; SURMAS, R.; MACHADO, V. F.; BONAGAMBA, T. J.	286
PG136 - Desenvolvimento de ferramenta computacional para obtenção automatizada de dados em testes comportamentais do tipo Campo Aberto	
OLIVEIRA, I. M. de; PAIVA, F. F.	288
PG137 - Avaliação da terapia fotodinâmica em células de melanoma murino	
ONO, B. A.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.	290
PG138 - Desenvolvimento de uma plataforma multimodal para o estudo da hemodinâmica cerebral: uma abordagem combinando ASL e NIRS	
PASCHOAL, A. M.; PAIVA, F. F.; MESQUITA, R.	291
PG139 - Moléculas de Rb2 em uma armadilha óptica	
PASSAGEM, H. F.; SILVA, P. C. V. da	293
PG140 - Shake-up effect in photoluminescence of integer quantum hall system formed in InGaAs/InP quantum wells	
PATRICIO, M. A. T.; PUSEP, Yu. A.; LAPIERRE, R. R.	295
PG141 - Estudos estruturais e funcionais de novos complexos do receptor PPARγ	
PAULA, K.; NASCIMENTO, A. S.	296

PG142 - Production of a Bose-Einstein condensate of sodium atoms and study of correlated photons produced by pairs of condensed atoms after cooperative excitation PEDROZO-PENAFIEL, E.; CASTILHO, P. C. M.; MERCADO-GUTIERREZ, E. D.; FARIAS, K. M.; BAGNATO, V. S.	298
PG143 - Análises de microscopia eletrônica de varredura de amostras de aveia submetidas à hidrólise pela endoglucanase I de <i>Trichoderma harzianum</i> (ThCel7B) PELLEGRINI, V. O. A.; REZENDE, C. A.; POLIKARPOV, I.	300
PG144 - Generalized geometric quantum speed limits PIRES, D. P.; SOARES-PINTO, D. O.	302
PG145 - Simulação de nanopartículas superparamagnéticas em campo magnético uniforme e não uniforme PIZETTA, D. C.; VIDOTO, E.L.G; MARTINS, M. J.; TANNUS, A.	303
PG146 - Implementação de técnicas por imagens de ressonância magnética no estudo de meios porosos POLLI, R. S.; OLIVEIRA, E. L.; ANDREETA, M. B.; BONAGAMBA, T. J.....	304
PG147 - Discriminating astrophysical scenarios with number of muons measurements in ultra high energy cosmic rays experiments PRADO, R. R.; CONCEIÇÃO, R.; PIMENTA, M.; SOUZA, V.....	306
PG148 - Estudos funcionais e estruturais de uma endoglucanase da família GH45 das hidrolases de glicosídeos RAMIA, M. P.; GODOY, A.; CAMILO, C. M.; KADOWAKI, M.; POLIKARPOV, I.	308
PG149 - Otimização de parâmetros para medidas DP-LIBS em folhas de soja RANULFI, A. C.; NICLODELLI, G.; SEILER, R. M. B.; ZANIN, J.; MAGALHÃES, A. B.; MILORI, D. M. B. P.....	309
PG150 - First-principles investigation of the adsorption properties of TM clusters on graphene REGO, C. R. C.; OLIVEIRA, L. N. de; TERESHCHUK, P.; SILVA, J. L. F. da	311
PG151 - Heterologous production, biophysics and structural characterization of xylose isomerase with potential for application in industrial fermentation of pentose REIS, C. V.; POLIKARPOV, I.	313
PG152 - Otimização da terapia fotodinâmica para câncer de pele através de dispositivos mecânicos: experimentação animal e estudo clínico REQUENA, M. B.; VOLLET FILHO, J. D.; RUSSIGNOLI, P.; KURACHI, C.; MENEZES, P. F. C.; BAGNATO, V. S.....	314

PG153 - Conjugation of nanocapsules with tumor targets for cancer diagnosis and therapy	
RIBOVSKI, L.; BERNARDI, J. C.; ZUCOLOTTI, V.	316
PG154 - Ordenamento estrutural e propriedade dielétrica em microondas dos sistemas $(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ e $(\text{Ba}_{1-y}\text{La}_y)_3\text{Ca}_{1+y}\text{Nb}_{2-y}\text{O}_9$	
RODRIGUES, J. E. F. S.; HERNANDES, A. C.	318
PG155 - Modelo farmacofórico e triagem virtual baseados na estrutura da enzima PtpA de Mycobacterium tuberculosis	
RODRIGUES, V. K. T.; GUIDO, R. V. C.	319
PG156 - Brazilian atomic fountain - second generation	
RODRIGUEZ S, A.; BUENO, C.; LARENAS, M. C.; BAGNATO, V. S.; MULLER, S.; MAGALHÃES, D. V.	321
PG157 - Crystal structure of Adenylosuccinate Lyase apo form from Schistosoma mansoni: a potential chemotherapeutic target	
ROMANELLO, L; TORINI, J.; BIRD, L; NETTLESHIP, J; OWENS, R; REDDIVARI, Y.; BRANDÃO NETO, J; PEREIRA, H. M.	322
PG158 - Dinâmica de transporte de fotossensibilizadores em células por meio de microscopia confocal e espectroscopia de fluorescência correlacionada	
ROMANO, R. A.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.; GUIMARÃES, F. E. G.; BAGNATO, V. S.	324
PG159 - Comparação de redes complexas aplicadas à interação de proteínas.	
RONQUI, J. R. F.; BAGNATO, G. G.; TRAVIESO, G.	326
PG160 - Development of a fluorescence lifetime imaging microscope for clinical applications	
ROSA, R. G. T.; JO, J. A.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.	327
PG161 - Structural insights into the activity mechanism of a dual GGDEF-EAL domain phosphodiesterase from Salmonella enterica	
ROSSETO, F. R.; NAVARRO, M. V. de A. S.	328
PG162 - Engenharia de potenciais confinantes em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades	
ROSSETTI, R. F.; MOUSSA, M. H. Y.	329
PG163 - Origin and tuning of the band gaps in transparent conducting oxides: the example of M_2O_3 (M = Al, Ga, In)	
SABINO, F. P.; BESSE, R.; OLIVEIRA, L. N. de; WEI, S. H.; DA SILVA, J. L. F. D.	330

PG164 - Simulações computacionais na proteína TM1030 da bactéria hipertermófila Thermotoga marítima	
SALCEDO, D. L. P.; HORJALES REBOREDO, E	332
PG165 - Characterization of odorant-binding proteins of Rhodilus prolixus	
SAMPAIO, R. P.; THIEMANN, O. H.	333
PG166 - EPR study of the oxyborate $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$	
SANTANA, V. T.; WALMSLEY, L.; FERNANDES, J. C.; CONTINENTINO, M. A.; NASCIMENTO, O. R.	335
PG167 - Nano graphene for photothermal therapy	
SANTOS, F. A. dos; BATISTA, C. B.; PAINO, I. M. M.; ZUCOLOTTTO, V.	336
PG168 - Estudo das relações quantitativas entre estrutura e atividade de uma série de inibidores azóis de Plasmodium falciparum	
SANTOS, J. dos; GUIDO, R. V. C.	337
PG169 - Máquinas quânticas térmicas e magnéticas	
SANTOS, M. L.; SOARE-PINTO, D. O.	339
PG170 - Síntese e aplicação de lipossomos plasmônicos multifuncionais na nanomedicina	
SANTOS, O. A.; BERNARDI, J. C.; ZUCOLOTTTO, V.	341
PG171 - Characterization of components of the biosynthesis and insertion pathways of selenocysteine in Naegleria gruberi: selenophosphate synthetase and tRNA^{Sec}	
SANTOS, T. M.; THIEMMAN, O. H.	342
PG172 - Processamento e análise de imagens para microscopia confocal	
SBRISSA NETO, D. A.; TRAVIESO, G.	344
PG173 - Dinâmica de operadores tensoriais em cadeias quânticas de spin	
SCHOSSLER, M. O.; PEREIRA, R. G.	346
PG174 - Caracterização das interações macromoleculares entre proteínas da via de síntese de selenocisteínas	
SCORTECCI, J. F.; SERRÃO, V. H. B.; FERNANDES, A. F.; BASSO, L. G. M.; THIEMANN, O. H.	348
PG175 - Magnetometria com centro de vacâncias de nitrogênio em diamante	
SEGURA, C. O.; SOARES-PINTO, D. O.; AZEVÊDO, E. R.; MUNIZ, S. R.; FILGUEIRAS, J. G.; GUIMARÃES, F. G.	350

PG176 - Avaliação da Terapia Fotodinâmica em cultura celular tridimensional por levitação magnética.	
SEKIMOTO, L. S. A.; PIRES, L.; SABINO, L. G.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C.	351
PG177 - Two-Component Landau Liquid Model for New State of Matter	
SERENONE, W. M.; MENDES, T.	353
PG178 - Characterization of macromolecular interactions from Escherichia coli selenocysteine pathway	
SERRAO, V. H. B.; FERNANDES, A. de F.; SCORTECCI, J. F.; BASSO, L. G. M.; HEEL, M. van; PORTUGAL, R. V.; THIEMANN, O. H.	355
PG179 - Protótipo Dataflow implementado em FPGA	
SILVA JUNIOR, J. T.; MATIAS, P.; RUGGIERO, C. A.	357
PG180 - Differential geometry method for protein conformational ensemble clustering and analyses; HPV E1-DBD dynamics study as a test case	
SILVA NETO, A. M.; MONTALVÃO, R. W.	359
PG181 - Novas estratégias para o diagnóstico e tratamento de onicomicose por terapia fotodinâmica.	
SILVA, A. P.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M.	360
PG182 - KBDM utilizando múltiplos truncamentos e clusterização na deconvolução de sinais de espectroscopia in vivo por RM	
SILVA, D. M. D. D. da; PAIVA, F. F.	362
PG183 - Elucidação de mecanismos estruturais da homeostase do c-di-GMP	
SILVA, E. E. D.; CARDOSO, A. R.; MENEGHELLO, R.; NAVARRO, M. V. A. S.	364
PG184 - Electron paramagnetic resonance study of vanadium oxide nanosquares	
SILVA, I. D. A.; NAVAS, D.; GONZALEZ, G.; MAGON, C. J.; GONZALEZ, J. P. D.	366
PG185 - Vibrational cooling of Rb₂ and KRb molecules	
SILVA, P. C. V.; PASSAGEM, H.; COLIN, R.; MARCASSA, L. G.	367
PG186 - Reformulação da abordagem pedagógica de kits da Experimentoteca do CDCC/USP em parceria com professores em formação	
SILVA, R. M. A. A.; SILVA, C. C.	369
PG187 - Técnica para análise de fenômenos de tempo curto	
SILVA, R. M. da; MOUSSA, M. H. Y.	371
PG188 - Determination of protein-protein complexes from sparse experimental data	
SILVA, S. R.; MONTALVÃO, R. W.	373

PG189 - Dinâmica de um condensado de Bose-Einstein contendo sólitons SMAIRA, A. F.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.	374
PG190 - Superabsorção via engenharia de interações átomo-campo e a derivação do princípio de Landauer a partir da segunda lei da termodinâmica SOARES, P. M.; MOUSSA, M. H. Y.	375
PG191 - Lifetime of InAs/GaAs quantum dots placed near thin metallic films SOBREIRA, F. W. A.; PEREIRA, R. G.; MAREGA JUNIOR, E.	377
PG192 - Física estatística de chuveiros atmosféricos extensos SOUSA, G. T. T.; SOUZA, V.	378
PG193 - Relações quantitativas entre a estrutura e atividade para uma série de antichagásicos derivados do fenarimol SOUZA, A. S.; FERREIRA, L. L. G.; ANDRICOPULO, A. D.	379
PG194 - Crystal structure and kinetic of Q289L a mutating catalytic residue in Methylthioadenosine Phosphorylase (MTAP) enzyme from Schistosoma mansoni SOUZA, J. R. T.; RADDI, M. M.; BRANDÃO NETO, J.; PEREIRA, H. M.	380
PG195 - Planejamento de inibidores da enzima cruzaina de Trypanosoma cruzi SOUZA, M. L.; FERREIRA, R. S.; SLAFER, B.; REZENDE JUNIOR, C. O.; DIAS, L. C.; ANDRICOPULO, A. D.	382
PG196 - Modular system for non-real-time subsystem management in a Nuclear Magnetic Resonance digital spectrometer SOUZA, P. V. B. D.; COELHO, F. B.; PIZETTA, D. C.; SILVA, D. M. D. D.; MARTINS, M. J.; VIDOTO, E. L. G.; TANNÚS, A.	384
PG197 - Detecção de radiação infravermelha para diagnóstico de tumores STRINGASCI, M. D.; SALVIO, A. G.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.	385
PG198 - Síntese de nanopartículas de PLGA contendo curcuminóides para otimização da inativação fotodinâmica de microrganismos SUZUKI, I.; INADA, N.; MARANGONI, V.; CORRÊA, T.; ZUCOLOTTI, V.; BAGNATO, V.	386
PG199 - Magnetic field driven interminiband charge transfer in InGaAs/InP superlattices TAVARES, B. G. M.; PUSEP, Y. A.; TITO, M. A.	388
PG200 - Investigation of the Momentum Distribution of an Excited Bose-Einstein Condensate by Free Expansion TAVARES, P. E. S.; FRITSCH, A. R.; VIVANCO, F. A. J.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S.	389

PG201 - Estudos estruturais na proteína P21 de Trypanosoma cruzi, molécula envolvida no processo de invasão celular	
TEIXEIRA, F. B.; CRUSCA, E.; HORJALES, E.; MUNTE, C. E.	391
PG202 - Síntese e descrição cristalográfica do sal picrato de lamivudina, 3TCH.pic. Modulação das propriedades de estado sólido e farmacêuticas.	
TENORIO, J.; ELLENA, J.	393
PG203 - Whispering gallery mode microresonators for biological sensing	
TOMAZIO, N. B.; OTUKA, A. J. G.; ALMEIDA, G. F. B.; MECHÓ, X. R.; ANDRÉS, M. V.; MENDONÇA, C. R.	395
PG204 - Study of the activation of PEL polysaccharide biosynthesis in Pseudomonas aeruginosa PA14 biofilm formation	
TORRES, N. U.; SILVA, S. S.; MATSUYAMA, B. Y.; CHELESKI, J.; NICASTRO, G. G.; BALDINI, R. L.; KRASTEVA, P. V.; FRONZES, R.; NAVARRO, M. V. A. S.	397
PG205 - Obtenção de distribuição de tamanhos de poros em perfilagem por Ressonância Magnética Nuclear	
TREVIZAN, W.; SOUZA, A.; HURLIMANN, M.; BONAGAMBA, T. J.	399
PG206 - Espectroscopia de correlação de fluorescência (FCS) aplicada em estudos de sistemas moleculares, biológicos e celulares	
TSUTAE, F. M.; MOREIRA, H. H. T.; ARAÚJO, A. P. U.; GUIMARÃES, F. E. G.	400
PG207 - Teoria quântica de campos a temperatura finita e o efeito Unruh	
ULIANA, C.; VANZELLA, D.	402
PG208 - Computação quântica adiabática usando qubits supercondutores	
VARGAS-GRAJALES, J. A.; BRITO, F.	403
PG209 - Rota para investigar a evolução dinâmica de vórtices multi-carregados em superfluidos atômicos	
VIVANCO, F. A. J.; TAVARES, P. E. S.; FRITSCH, A. R.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. de L.; BAGNATO, V. S.	404
PG210 - Detection of citrus canker and huanglongbing using fluorescence imaging spectroscopy (FIS) technique	
WETTERICH, C. B.; NEVES, R. F. O.; MARCASSA, L. G.	406
PG211 - Density functional theory approach to the single electron transistor	
ZAWADZKI, K.; OLIVEIRA, L. N.	408



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

IC1

Caracterização espectroscópica de vidros e vitrocerâmicas oxifluoretos dopados com terras raras como potenciais meios ativos para lasers

ALMEIDA FILHO, F. P.¹; CAMARGO, A. S. S.¹

flavio.pin.filho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho concerne ao estudo de vidros e vitrocerâmicas dopados com íons de terra rara trivalente, que continuam no foco de intensa pesquisa para aplicações laser na região do infravermelho e visível. Propõe-se ao estudo teórico de alguns íons, como: Er^{3+} , Nd^{3+} , Tm^{3+} e Yb^{3+} bem como a aplicação da teoria de Judd-Ofelt para o cálculo de tempo de vida. Através do espectro de absorção, calculamos os parâmetros $\Omega_2=0,595 \times 10^{-19}$, $\Omega_4=0,202 \times 10^{-19}$ e $\Omega_6=0,176 \times 10^{-19}$, para a matriz $15\text{Er}3\%$, obtivemos um rendimento quântico de 0,79 e um fator de qualidade de 1,14, que estão entre as maiores já reportadas na literatura (1), o que indica uma matriz com uma boa opção para meios ativos para laser.

Palavras-chave: Caracterização espectroscópica . Terra rara. Judd-ofelt.

Referências:

1 PHILIPPS, J. F. et al. Spectroscopic and lasing properties of $\text{Er}^{3+}:\text{Yb}^{3+}$ -doped fluoride phosphate glasses. **Applied Physics B**, v. 72, n. 4, p. 399-405, 2001.

IC2

Análise da interação proteica entre CrNIP7 e CrSBDS de *Chlamydomonas reinhardtii*

BARRA, A. L. C.¹; GUTIERREZ, R. F.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹

angelica.barra@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A biogênese de ribossomo é um processo altamente complexo, regulado e ordenado. A levedura *Saccharomyces cerevisiae* é amplamente utilizada como modelo biológico no estudo da biogênese de ribossomos em eucariotos, pois, em geral, os fatores envolvidos nesse processo são conservados evolutivamente em Eukarya. Dessa forma, os estudos feitos em levedura podem ser úteis no entendimento do sistema em eucariotos superiores, como os mamíferos. No entanto, alguns fatores envolvidos na biogênese de ribossomos em levedura apresentam funções divergentes em mamíferos. A proteína SBDS é membro de uma família de proteínas altamente conservadas em Archae e eucariotos. Sua participação na biogênese de ribossomos já foi comprovada em humanos e leveduras. (1) Em humanos, mutações em SBDS estão relacionadas a 90% dos casos da Síndrome de Shwachman Bodian Diamond (SDS) entre outras doenças. (1) As proteínas NIP7 de leveduras e humanos também estão envolvidas no processamento ribossomal, porém participam na síntese de subunidades diferentes, sendo, portanto, um fator divergente. (2) A proteína homóloga a NIP7, chamada CrNIP7, da alga verde unicelular *Chlamydomonas reinhardtii*, está sendo estudada quanto a sua função e aos seus parceiros proteicos em nosso laboratório. Assim, esse projeto teve como principal proposta o isolamento da ORF de CrSBDS, que codifica a proteína homóloga de SBDS humana, em *C. reinhardtii* e a caracterização da interação in vivo e in vitro entre as proteínas CrSBDS e CrNIP7. Ao realizar uma busca no genoma de *C. reinhardtii* utilizando a sequência de SBDS humana, encontramos uma proteína homóloga (XP_001689481.1) anotada, porém com sequência parcial e ainda não caracterizada. Então, completamos a sequência utilizando o banco de dados *Sequence Read Archive* (SRA) para *C. reinhardtii*, uma plataforma de sequenciamento de alto rendimento. Com a sequência completa foi possível desenhar *primers* para a amplificação da ORF da CrSBDS a partir do cDNA da alga. O DNA amplificado foi subclonado no vetor de propagação, pUC19 e sequenciado e depois clonado em vetor de duplo híbrido, pGAD-HA, e também em vetor de expressão bacteriano, pET28a. Para o experimento de duplo híbrido, a linhagem L40 de *S. cerevisiae* foi co-transformada com as construções pLexA-N-CrNip7 e pGAD-HA-CrSBDS e plaqueada em meio seletivo. A análise de interação proteica, por ativação dos genes repórteres, foi realizada pelo experimento da beta-galactosidase em papel de filtro e crescimento da levedura em quantidades gradativas de 3-AT (3-amino-1,2,4-triazol). No experimento de *pull down*, as proteínas CrNip7 e 6His-CrSBDS foram expressas separadamente em *E. coli* Rosetta (DE3), purificadas e submetidas ao teste de interação por co-purificação em resina de níquel. A interação foi analisada por SDS-PAGE. No ensaio de duplo híbrido, foi observada a interação fraca entre as proteínas em questão. A confirmação dessa interação foi feita por meio do ensaio de *pull down*, no entanto, serão realizadas análises por espectrometria de massas para confirmação da identidade das proteínas. Portanto, com os dados obtidos até o momento, já temos forte indício de que essas proteínas são parceiras no processo de biogênese de ribossomos em *C. reinhardtii*.

Palavras-chave: Biogênese de ribossomos. *Chlamydomonas reinhardtii*. Interação proteica.

Referências:

1 HESLING, C. et al. The Shwachman bodian diamond syndrome associated protein interacts with HsNip7 and its down regulation affects gene expression at the transcriptional and translational levels. **Experimental Cell Research**, v. 313, n. 20, p. 4180-4195, 2007.

2 MORELLO, L. G. **Caracterização funcional das proteínas NIP7 e FTSJ3 no processamento o RNA ribossomal em células humanas.** 2012. 127p. Tese (Doutorado em Genética e Biologia Molecular) - Instituto de Biologia, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012.

IC3

Estudo estrutural entre o receptor PPAR gama e pteroilglutamatos

BENTO, G. I. V.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

graziele.bento@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O receptor PPAR gama, assim como os demais membros da família dos receptores nucleares, contem um motivo de ligação ao DNA (DNA-binding domain, DBD) e um domínio C-terminal hidrofóbico que interage com o ligante (ligand binding domain, LDB). A interação PPARg-ligante permite que o receptor PPARg forme um complexo heterodimérico com o receptor de ácido retinóico. Esse complexo reconhece e se liga a elementos responsivos do DNA, recrutando proteínas co-ativadoras que irão promover a transcrição de genes que codificam proteínas cuja atividade está intimamente relacionada ao aumento da sensibilidade à insulina e a processos de sinalização celular que culminam na captação de glicose nos tecidos adiposo e muscular.(1-2) Portanto, o PPARg é um interessante alvo molecular no tratamento da diabetes mellitus tipo II (não insulino-dependente). Os primeiros ligantes descritos para o PPARg foram os tiazolidinedionas (TZD). A rosiglitazona é um exemplo de TZD que se liga com alta afinidade ao receptor alvo (Kd 40 nM).(2) Entretanto, apesar de demonstrar aumento de sensibilidade à insulina e efeitos antidiabéticos *in vivo*, seu uso está associado com sérios efeitos adversos tais como aumento na adipogênese, retenção de fluidos e insuficiência cardíaca. Por conta disso, o fármaco foi retirado do mercado em diversos países, incluindo o Brasil. Técnicas computacionais realizadas no grupo de Biotecnologia Molecular do IFSC demonstraram uma possível interação entre o PPARg e novos ligantes, tais como o metotrexato e ácido fólico. Diante disso, o projeto proposto pretende caracterizar estruturalmente a interação entre o LBD do PPARg e tais ligantes. Para tanto, o domínio em questão será expresso heterologicamente em *E. coli* BL21 (D3E) e purificado. Por meio de ensaios de cristalização, espera-se obter o cristal do complexo LBD-ligante, que por sua vez será submetido à difração de raio-X. Os dados da difração serão obtidos com o difratômetro Rigaku Ultra X-18 ou através da difração pela luz MX-2 no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. O problema das fases será resolvido através da técnica de substituição molecular. O conhecimento dos aspectos estruturais dos complexos PPARg-metotrexato e PPARg-ácido fólico poderá guiar estudos na busca de fármacos mais eficazes e que não apresentem efeitos indesejados no tratamento de diabetes tipo II.

Palavras-chave: PPAR gama. Diabetes mellitus tipo II. Cristalografia.

Referências:

1 DUMASIA, R. et al. Role of PPAR- gamma agonist thiazolidinediones in treatment of pre-diabetic and diabetic individuals: a cardiovascular perspective.. **Current Drug Targets, Cardiovascular & Hematological Disorders**, v. 5, n. 5, p. 337-386, 2005.

2 BERGER J.; MOLLER, D. E. The mechanisms of action of PPARs. **Annual Review of Medicine**,



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

v. 53, p. 409, 2002. doi: 0066-4219/02/0218-0409.

IC4

Caracterização das interações proteína-proteína da U5-200k spliceossomal em *Trypanosoma brucei*

BORALLI, C. M. dos S¹; SILVA, I.R.¹; SILVA, M. T. A. da¹; THIEMANN, O. H¹

camila.boralli@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A excisão de sequências intrônicas por precursores de mRNAs é um passo crítico durante a expressão gênica eucariótica. Essa reação é catalisada pelo spliceossomo, um complexo macromolecular composto por partículas ribonucleoproteicas nucleares (U1, U2, U4/U6, U5 snRNPs). A montagem do spliceossomo e catálise do *splicing* ocorrem em um processo ordenado de várias etapas, que inclui vários rearranjos conformacionais. (1) Em tripanossomatídeos, onde os genes são transcritos em longas unidades policistrônicas, a reação de *trans-splicing* é requerida para geração de transcritos monocistrônicos maduros, concomitante à poliadenilação na extremidade 3'. Durante o *trans-splicing*, um pequeno miniexon não codificante, conhecido como *spliced leader* (SL) RNA é adicionado a cada exon. (2) A proteína U5-200K, componente da partícula U5 snRNP, é necessária para a ativação do complexo B* catalítico, e atua despareando o U4/U6 snRNAs heteroduplex através da sua atividade helicase e ATPase. Entretanto, em *T. brucei*, esta proteína não conserva o domínio Sec63 da região C-terminal, responsável por recrutar outros fatores de *splicing* em leveduras e humano. (3) Para a investigação da função desta proteína, U5-200K de *T. brucei*, a proteína completa, bem como construções sem o segundo domínio helicase (segundo cassete) e sem a região C-terminal apenas, foram subclonadas no vetor pC-PTP-NEO de recombinação homóloga que insere uma extensão PTP (ProtC-TEV-ProtA) na extremidade C-terminal da proteína recombinante. Após a transfecção em *T. brucei* e a seleção dos clones, foram confirmadas a recombinação homóloga no DNA genômico por PCR e a expressão das proteínas fusionadas à cauda PTP-tag por *Western blotting*. A técnica de purificação em tandem por afinidade à extensão PTP permite a identificação de interações proteína-proteína e proteína-RNA. (3) A purificação das diferentes proteínas recombinantes somada à análise dos dados de espectroscopia de massas realizada com os diferentes complexos encontrados através da purificação mostrou diferentes parceiros de interação para a proteína inteira e a proteína truncada no segundo cassete. Além disso, curvas de crescimento das culturas transfectadas foram construídas e mostraram que a cultura contendo parasitas expressando a proteína truncada no segundo cassete apresentava um defeito de crescimento, indicando que esse cassete é funcionalmente importante. Por fim, a análise por imunofluorescência foi realizada, utilizando anticorpo para a cauda PTP, para analisar a localização das proteínas inteira e truncada no segundo cassete, e mostrou que a proteína truncada se encontrava no citoplasma enquanto a proteína inteira estava no núcleo, indicando que sem o segundo cassete a proteína não é capaz de ser endereçada para seu lugar correto. Experimentos futuros podem trazer mais informações sobre a importância do domínio C-terminal, bem como do segundo cassete, para proteína U5-200k e seus parceiros de interação.

Palavras-chave: *Trypanosoma brucei*. *trans-splicing*. U5-200k.

Referências:

- 1 MOZAFFARI-JOVIN, S. et al. Novel regulatory principles of the spliceosomal Brr2 RNA helicase and links to retinal disease in humans. **RNA Biology**, v. 11, n. 4, p. 298-312, 2014. doi: 10.4161/rna.28353.
- 2 GUNZL, A. The pre-mRNA splicing machinery of Trypanosomes: complex or simplified?. **Eukaryotic Cell**, v. 9, n. 8, p. 1159-1170, 2010. doi: 10.1128/EC.00113-10.
- 3 DA SILVA, M. T. et al. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, 2011. doi:10.1590/S0074-02762011000200003.

IC5

Development of a genosensor for sickle-cell disease trait determination

BRAMORSKI, C.¹; BRAZACA, L. C.¹; JANEGITZ, B. C.²; ZUCOLOTTI, V.¹

camila.bramorski@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Ciências da Natureza, Matemática e Educação - UFSCAR

Sickle-cell disease (SCD) is the most common hereditary condition in Brazil and the mean pathological hemoglobin mutation worldwide. (1) It is caused by a single mutation in a nitrogenous base leading to the production of HbS, an abnormal form of hemoglobin, instead of HbA, the healthy form of the protein. Affected individuals present anemia and other medical conditions such as low oxygenation of tissues, severe pain and cardiovascular diseases. Life expectancy is reduced and in underdeveloped regions it is estimated that 50% of SCD affected children die before their fifth birthday. (2) Currently, neonatal screening is mainly performed by microscopy and protein electrophoresis techniques which are time consuming, expensive and unable to detect heterozygous carriers. Also, due population migration, the number of affected individuals have been rising, making it necessary more affordable, simple and low-cost techniques for genetic counseling, diagnosis and treatment. (3) Here we developed an electrochemical genosensor based on Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS). The device was capable of discerning heterozygous and homozygous SCD carriers in a simple, rapid and low cost manner. By Self Assembled Monolayer (SAM) technique, a single DNA strand complementary to HbS human gene was immobilized on gold. When exposed to HbA, charge transfer resistance was significantly lower than after its exposure to HbS, owing to different hybridization rates. Furthermore, increasing concentrations of HbS lead to a linear increase in charge transfer resistance in a wide range of concentrations (0.01 to $7.5 \mu\text{mol L}^{-1}$, $R^2 = 0.927$). The biosensor presented a detection limit of 7.0 nmol L^{-1} and good stability, with 29% decay after 50 successive measurements of cyclic voltammetry. We expect this device to facilitate sickle cell disease early diagnosis and genetic counseling by providing a low cost and rapid tool.

Keywords: Sickle-cell disease. Electrochemical genosensor . Self assembled monolayer.

Referências:

- 1 GUIMARAES, C. T. L.; COELHO, G. O.. The importance of genetic counseling at sickle cell anemia. **Ciência & Saúde Coletiva**, v. 15, n. 1, p. 1733-1740, 2010. doi: 10.1590/S1413-81232010000700085.
- 2 LOBITZ, S. et al. Incidence of sickle cell disease in an unselected cohort of neonates born in Berlin, Germany. **European Journal of Human Genetics**, v. 22, n. 8, p. 1051-1053, 2014. doi: 10.1038/ejhg.2013.286.
- 3 PIEL, F. B. et al. Global distribution of the sickle cell gene and geographical confirmation of the



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

malaria hypothesis. **Nature Communications**, v. 1, n. 104, p. 1, 2010. doi: 10.1038/ncomms1104.

IC6

Polímeros: aplicações e impactos no meio ambiente sob a perspectiva de alunos do Ensino Fundamental

CAMPELO, R.¹; COLNAGO, N. A. S.²; CORDEIRO, A. P. M.³; BORTOLETTO-SANTOS, R. C.²; SOARES, S. R. B.³; MASCARENHAS, Y. P.¹

rafael.campelo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Estudo Avançados - USP

³Escola Estadual Jesuíno de Arruda

A maioria dos objetos que utilizamos hoje em dia possuem polímeros sintéticos na sua constituição e apesar de sua utilidade prática e econômica esses produtos causam muitos problemas ao ambiente, pois em geral não são biodegradáveis. Portanto, o presente projeto teve como objetivos explicar o conceito e as principais características dos polímeros (1) e os impactos ambientais do seu descarte; desenvolver conhecimentos atitudinais e formação pessoal de alunos do ensino fundamental (EF); propiciar aos bolsistas de iniciação científica (IC) o contato com a escola pública, fazendo com que estes tivessem experiências em sala de aula. As atividades foram desenvolvidas com 160 alunos do 6º ano (EF II) da E.E. Jesuíno de Arruda, professores de Língua Portuguesa, História, Geografia, Educação Física e Ciências. As etapas do projeto foram desenvolvidas nas salas de aula, nos laboratórios de informática e de ciências da escola e nas dependências do IEA/SC/USP, contando com o apoio dos bolsistas de IC do IEA-USP-São Carlos e da pesquisadora visitante. Na primeira etapa, a fim de introduzir o conceito de polímeros, os bolsistas e a professora orientadora do projeto realizaram dois experimentos de caráter demonstrativo (derretimento de isopor e extração do DNA do morango). Foram aplicados um pré-teste, a fim de avaliar o conhecimento prévio dos alunos um pós-teste, para avaliar o conhecimento após o experimento. As turmas foram divididas em grupos, de quatro integrantes, cada grupo ficou responsável por pesquisar e responder uma ou duas questões sobre polímeros. Em seguida, os bolsistas realizaram o fechamento do conceito através de uma aula expositiva. Motivados pela pesquisa histórica, orientados pelo professor de História realizaram uma exposição com objetos antigos de diferentes épocas (rádios, televisores, ferros de passar), aberta à visitação para todos os alunos envolvidos, com objetivo de compararem os diferentes objetos quanto à utilização de polímeros. Após a exposição os alunos deram suas opiniões em formato de entrevista que foi gravada e editada em formato de telejornal. Na disciplina de Geografia, eles pesquisaram e debateram sobre os danos ambientais que os materiais poliméricos ocasionam. Em Língua Portuguesa elaboraram e ilustraram um texto sobre a transformação do látex à borracha (escolar). Na disciplina de Educação Física foi elaborada uma performance sobre o tema polímeros gravada em vídeo. Todo o material confeccionado pelos alunos, durante as atividades descritas foi reunido e organizado no formato de uma Revista Digital e será disponibilizada no portal www.cienciaweb.com.br. Verificou-se certa dificuldade no entendimento da temática polímeros, pelos alunos envolvidos nas atividades, talvez por não ser um tema comum no ensino fundamental, embora presente em seu cotidiano. As atividades proporcionaram aos alunos de IC exercer sua prática com alunos de escola pública.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Palavras-chave: Polímeros. Meio ambiente. Ensino fundamental.

Referências:

1 GORNI, A. A. **Introdução aos plásticos**. Disponível em: <http://www.torresnetworking.com/Sociesc/introducao_aos_plasticos.pdf>. Acesso em: 20 fev. 2014.

IC7

Estudo do complexo polimérico $PEGD - LiClO_4$ através de espectroscopia e relaxometria por RMNCARDOSO, C¹; BONAGAMBA, T. J¹; ÁLVAREZ, D. J¹

camilacardoso@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho teve como objetivo estudar a dinâmica dos íons lítio e das cadeias poliméricas, assim como propriedades estruturais e morfológicas da matriz polimérica do Diestrato de Polietileno Glicol (PEGD) dopado com sal de perclorato de lítio ($LiClO_4$), em função da concentração da dopagem. Podemos observar o comportamento de sua estrutura a partir da técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), visando a sua possível aplicação do PEGD como eletrólito em baterias íons lítio. RMN, de um modo geral, é um método para a caracterização de substâncias. Os parâmetros obtidos a partir de RMN, tais como tempos de relaxação e padrões quadrupolares, são sensíveis a mudanças de temperatura, concentração e os processos dinâmicos em que estão envolvidos. Isto faz com que seja uma ferramenta experimental útil, que permite estudar o portador de carga, bem como a matriz polimérica de forma independente. A partir desses estudos, é possível obter informações como tipo de estrutura, morfologia e dinâmica dos íons lítio do material em questão. Como procedimento para realização do experimento tivemos que o polímero PEGD foi dopado com sal de lítio, sendo que a concentração de íons de Li^+ é dada pela razão: $y = [O]/[Li]$. Para preparação das amostras quantidades apropriadas dos precursores foram colocadas em um recipiente, agitadas e aquecidas a uma temperatura de 80°C de forma homogênea (por 4 horas). A próxima etapa foi a secagem a vácuo da amostra, por 16 horas. Em seguida, foram realizados os experimentos de RMN. Ao realizar os experimentos observamos que os espectros de RMN de 7Li mostram a presença de um padrão pó quadrupolar. Isso ocorre pelo fato do núcleo 7Li ter spin 3/2 e devido à estrutura cristalina da amostra. (1-2) A diminuição da frequência das linhas satélite em função da temperatura indica que na fase desordenada as mobilidades do polímero e do íon Li^+ devem ser grandes o suficiente para interromper a interação quadrupolar. Na temperatura de fusão (35°C) há mudanças no padrão de pó quadrupolar. Entretanto, na presença de uma grande quantidade de Li^+ esse padrão de pó quadrupolar, mesmo bem acima do ponto de fusão, se mantém. Isso indica um ordenamento na estrutura polimérica, que é ocasionada pela presença do Li. Essa interação quadrupolar desaparece, devido ao aumento da mobilidade do íon lítio. Ao se comparar os tempos de relaxação longitudinal (T_1) na temperatura ambiente para as diferentes dopagens, observa-se um aumento de T_1 em amostras com uma maior dopagem. Isso indica uma menor mobilidade para grandes dopagens e pode ser explicado com o aumento da polaridade, resultando na compactação das cadeias poliméricas. Também verifica-se um decaimento do tempo de relaxação longitudinal e, nas amostras de maiores dopagem, encontramos um salto do tempo de relaxação em torno do ponto de fusão, o que indica uma mudança da estrutura do complexo polimérico conforme o aumento da temperatura. Isso pode ocorrer porque quando se aumenta a temperatura há um aumento da mobilidade do sistema.

Palavras-chave: PEGD. Ressonância Magnética Nuclear. Condutores iônicos.

Referências:

- 1 ALVES-SANTOS, M. et al. ^7Li NMR diffusion coefficient measurements on the Li^+ -doped ABA triblock copolymer poly(ethylene glycol) distearate. **Solid State Ionics**, v. 176, n. 11-12, p. 1123, 2005. doi: 10.1016/j.ssi.2005.01.006.
- 2 GIOTTO, M. V. et al. Phase behavior and dynamics of the ABA triblock copolymer poly(Ethylene Glycol) distearate doped with alkali metal salts. **Macromolecules**, v. 35, n. 9, p. 3576-83, 2002.

IC8

Efeitos das condições de cultivo sobre crescimento e produção de biossurfactante por bactéria halofílica oriunda de reservatório de petróleo

CARVALHO, K. F.¹; CORRÊA, T.²; BOSSOLAN, N. R. S.²

karen.freire.carvalho@gmail.com

¹Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

²Instituto de Física de São Carlos - USP

O presente trabalho buscou verificar as condições ótimas de crescimento e de produção de biossurfactante por uma bactéria isolada a partir de amostras de óleo de um reservatório *offshore* localizado no sudeste do Brasil. Biossurfactantes são moléculas de interesse para a indústria petrolífera pois possuem grande potencial de aplicação na recuperação avançada de petróleo (*Microbial Enhanced Oil Recovery*). (1) Inicialmente, cultivos do isolado bacteriano O9-01 foram testados em condições distintas de temperatura e salinidade, utilizando-se caldo LB. As salinidades testadas foram 0, 17, 5, 35 e 70g/L $NaCl$ e as temperaturas de incubação, 37, 55 e 80°C. O crescimento celular foi avaliado por medidas de densidade óptica (a 600nm). A produção de biossurfactante foi avaliada pelos testes de emulsificação (E_{24}) (2) e do Colapso da Gota (3), a partir de alíquotas dos cultivos, com e sem células. Destes experimentos, selecionou-se a condição que mais favoreceu o crescimento e a produção de biossurfactante: 70g/L e 37°C. Nesta condição, o Meio Mineral, um meio definido, foi testado quanto ao seu favorecimento no crescimento celular e na produção de biossurfactante, tendo sacarose como fonte de carbono. Neste meio, três fontes de nitrogênio ($NaNO_3$, NH_4Cl , NH_4NO_3) e a adição de extrato de levedura foram testados; a produção de biossurfactante foi avaliada somente a partir de alíquotas sem células do cultivo. Nos testes com caldo LB a 37°C os índices de emulsificação variaram de 50% (35 g/L) a 51% (70 g/L) para o sobrenadante livre de células. Nos testes com Meio Mineral, a variação da fonte de nitrogênio e a presença ou não de extrato de levedura não tiveram grande interferência no crescimento celular, que teve desempenho semelhante em todas as condições testadas. Já a produção de biossurfactante foi maior na ausência de extrato de levedura em todos os casos e se mostrou praticamente estável, com índices de E_{24} próximos a 50%, a partir das 140 horas de cultivo estático, quando NH_4Cl foi utilizado como fonte de nitrogênio. Em uma próxima etapa do trabalho, serão testadas fontes de carbono (solúveis e insolúveis) na tentativa de identificar uma condição de cultivo que favoreça ainda mais a produção de biossurfactante por este isolado.

Palavras-chave: Biossurfactante. Petróleo. Halófilo.

Referências:

1 GUDIÑA, E. J. et al. Isolation and study of microorganisms from oil samples for application in Enhanced Oil Recovery. **International Biodeterioration & Biodegradation**, v. 68, p. 56-64, 2012. doi: 10.1016/j.ibiod.2012.01.001.

2 COOPER, D. G.; GOLDENBERG, B. G. Surface-active agents from two *Bacillus* species. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 53, n. 2, p. 224-229, 1987.

3 WALTER, V.; SYLDATK, C.; HAUSMANN, R. Screening concepts for the isolation of biosurfactant producing microorganisms. **Advances in Experimental Medicine and Biology**, v. 672, p. 1-13, 2010. doi: 10.1007/978-1-4419-5979-9_1.

IC9

Estudos e aplicações dos módulos de ligação à carboidratos das hidrolases de glicosídeos na otimização da despolimerização de biomassa

CURTOLO, F.¹; BERNARDES, A.¹; POLIKARPOV, I.¹

felipe.curtolo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A demanda por energia no mundo deve crescer muito nos próximos anos, principalmente, em países emergentes. Entretanto, a diminuição das reservas de petróleo, o aquecimento global e a emissão de gases do efeito estufa indicam que, para que possamos ser autossuficientes energeticamente, devemos possuir uma matriz energética diversificada e sustentável. O Brasil, como um dos maiores produtores agrícolas do mundo, gera uma quantidade enorme de resíduos lignocelulósicos, sendo que, essa biomassa formada majoritariamente por polissacarídeos de celulose e hemicelulose, é uma fonte de açúcares fermentáveis que pode ser utilizada para a produção de bioetanol de segunda geração (E2G). (1) A conversão da biomassa em açúcares fermentáveis se dá através da ação de coquetéis enzimáticos compostos por hidrolases de glicosídeos (GHs) e enzimas auxiliares que promovem a hidrólise desses polissacarídeos. (2) Todavia, a recalcitrância da celulose e o alto preço dos preparados enzimáticos utilizados para hidrólise comprometem a produção de E2G. Logo, o desenvolvimento racional de coquetéis enzimáticos é um processo que depende necessariamente da análise e compreensão da estrutura-função proteica e estudos sinérgicos dos componentes individuais dos preparados enzimáticos. Um aumento do reconhecimento dos polímeros de celulose pelas GHs, mediado pelos módulos de ligação a carboidratos (CBMs), aumentaria a atividade dessas enzimas em substratos insolúveis. (3) Portanto pretende-se compreender, a nível molecular, como os CBMs influenciam no reconhecimento e despolimerização de substratos insolúveis e recalcitrantes através de estudos com CBMs provenientes de diversas GHs de bactérias e fungos. Assim sendo, selecionou-se e clonou-se CBMs de GHs de famílias de exoglucanases e endoglucanases. Esses CBMs posteriormente foram expressos e purificados isoladamente e utilizados em ensaios de atividade em diferentes substratos celulósicos para avaliar como eles poderiam influenciar na taxa de despolimerização da celulose. Os resultados obtidos mostram que a adição de CBMs de exoglucanases e endoglucanases aumenta a atividade hidrolítica dos coquetéis enzimáticos. Isto é, mesmo não possuindo atividade catalítica, os CBMs se ligam às cadeias de celulose aumentando o acesso das GHs e, conseqüentemente, da formação de açúcares redutores. Uma melhor compreensão dessa especificidade e dos mecanismos de ação podem ser elucidados por estudos estruturais e funcionais que ainda serão realizados, sendo que esta compreensão pode refletir diretamente sobre a capacidade de produzir novos e mais eficientes preparados enzimáticos específicos para a despolimerização da biomassa disponível no país.

Palavras-chave: Hidrólise enzimática. Celulose. Módulos de ligação à carboidratos.

Referências:

1 ZHANG, Y.; LI, Q.; SU, J.; LIN, Y.; HUANG, Z.; LU, Y.; SUN, G.; YANG, M.; HUANG, A.; HU, H.;

ZHU, Y. A green and efficient technology for the degradation of cellulosic materials: structure changes and enhanced enzymatic hydrolysis of natural cellulose pretreated by synergistic interaction of mechanic. **Bioresource Technology**, v. 177, p. 176-181, 2015. doi: 10.1016/j.biortech.2014.11.085.

2 CANILHA, L.; CHANDEL, A. K.; MILESSI, T. S. S.; ANTUNES, F. A. F.; FREITAS, W. L. C.; FELIPE, M. G. A.; DA SILVA, S. S. Bioconversion of sugarcane biomass into ethanol: an overview about composition, pretreatment methods, detoxification of hydrolysates, enzymatic saccharification, and ethanol fermentation. **Journal of Biomedicine and Biotechnology**, v. 2012, p. 989572-1-989572-15, 2012. doi: 10.1155/2012/989572.

3 GILBERT, H. J.; KNOX, J. P.; BORASTON, A. B. Advances in understanding the molecular basis of plant cell wall polysaccharide recognition by carbohydrate-binding-modules. **Current Opinion in Structural Biology**, v. 23, n. 5, p. 669-677, 2013. doi: 10.1016/j.sbi.2013.05.005.

IC10

Simulação computacional de um relógio atômico com átomos frios

DE SOUSA, G.¹; MUNIZ, S. R.¹

guilherme2.sousa@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde o início do desenvolvimento tecnológico no século XX, a necessidade de medições precisas de diversas grandezas e a construção de padrões internacionais se fez vital para o progresso da ciência no mundo. Diversos equipamentos hoje operam tendo como base padrões de medidas definidos no Sistema Internacional, o SI. A medição precisa dessas grandezas físicas define a área de metrologia. No caso do tempo, a unidade fundamental é o segundo, que é atualmente definida em termos da frequência de uma transição atômica do átomo de Césio, cuja a medida é feita em relógios atômicos. Na prática, essa medida pode ser feita em diversos tipos de relógios, tendo o átomo de Césio como padrão primário. O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo computacional para o funcionamento de um relógio atômico baseado em átomos frios (resfriados a laser), a fim de otimizar parâmetros e procedimentos experimentais, visando o aumento da precisão e exatidão desses relógios. (1) Para isso, foram desenvolvidos algoritmos, implementados na linguagem Julia, para simular os processos de medida e a evolução dos observáveis num sistema de muitas partículas (representando átomos espacialmente separados e com velocidades aleatórias), seguindo uma abordagem estatística inspirada no método de Monte-Carlo. O algoritmo é modular e bastante flexível, permitindo facilmente introduzir e testar computacionalmente ideias e medidas reais, de interesse experimental, como por exemplo: simular a expansão livre de uma nuvem atômica, relacionando-a com a medida de temperatura da amostra, ou o sinal óptico medido num experimento de franjas de Ramsey (2), que reflete evolução da população de estados atômicos (representados numa abordagem semiclássica, em termos de spins fictícios). Resultados preliminares indicam a possibilidade de se estudar ainda efeitos de alargamento (fontes de incertezas) produzidos pela inhomogeneidade de campos magnéticos externos e efeitos colisionais. O projeto está em fase de desenvolvimento e seus resultados serão posteriormente comparados a dados experimentais coletados no laboratório de física atômica do IFSC/USP.

Palavras-chave: Simulação. Relógio atômico. Átomos frios.

Referências:

- 1 MULLER, S. T. **Padrão de referência compacto**. 2010. 126p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 2 BEBEACHIBULI, A.. **Relógio atômico a feixe efusivo de césio: estudo da estabilidade e da acurácia como função do deslocamento da frequência atômica devido ao Efeito Zeeman de segunda ordem, ao Cavity Pulling e ao Rabi**. 2003. 117p. Tese (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

IC11

Triagem biológica de candidatos a inibidores da enzima enolase de *plasmodium falciparum*

DE SOUZA, J. O.¹; BUENO, R. V.¹; MALUF, F. V.¹; DE SOUSA, L. R. F.¹; GARCIA, C. R. S.²

juliana2.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Biociências - USP

A malária é causada por protozoários do gênero *Plasmodium*. O *P. falciparum* é o agente etiológico responsável pela forma mais severa desta parasitose. Em 2013, ocorreram cerca de 584.000 mortes de malária. A glicólise é uma via metabólica essencial para o desenvolvimento do *Plasmodium ssp*, pois possui papel central na obtenção de energia do parasita, portanto se destaca entre os alvos metabólicos para desenvolvimento de novos fármacos para a malária. A enolase (E.C. 4.2.1.11), nona enzima da via glicolítica, catalisa a conversão do substrato 2-fosfoglicerato (2-PG) em fosfoenolpiruvato (PEP). Em células infectadas pelo parasita a atividade catalítica da enolase é aumentada em 15 vezes, sugerindo função importante para a manutenção do parasita. Em vista disso, os objetivos deste projeto de iniciação científica são a descoberta e caracterização de novos inibidores da enzima enolase de *P. falciparum* através da triagem biológica da coleção Malaria Box. (1) Ensaio de expressão indicaram que a enolase foi produzida em maior escala em sistema bacteriano (Rosetta DE3) com a construção no pETTrx-1a. A enolase foi obtida com elevado teor de pureza através de técnicas cromatográficas de afinidade e exclusão por tamanho. A atividade enzimática da enolase foi medida indiretamente pela produção de ATP e consequente emissão de luz em sistema acoplado com as enzimas piruvato quinase e luciferase. Para a triagem de inibidores, incubou-se os 400 compostos da Malaria Box na concentração de 50 μ M com a mistura reacional por 10 min. Em seguida, a reação foi iniciada pela adição do substrato 2-PG e monitorada no comprimento de onda de 535 nm. Os compostos com atividade inibitória promissora foram reavaliados contra o sistema acoplado para eliminar os falsos positivos. Entre os 400 compostos disponíveis no Malaria Box, identificaram-se 50 compostos com atividade inibitória superior a 40% na concentração avaliada (50 μ M). Este número representa 12,5 % de compostos ativos frente a enolase. Além disso, 10 compostos apresentaram atividade inibitória superior a 80% e 5 deles tiveram atividade inibitória de 100%. Estes compostos possuem no máximo 40 % de similaridade estrutural entre si e diferem significativamente dos inibidores de enolase reportados anteriormente. A identificação de novas classes de inibidores para a enolase de *P. falciparum* representa um avanço importante na descoberta e desenvolvimento de novos fármacos antimaláricos com mecanismo de ação inovador. Os inibidores da enzima foram adquiridos de representantes comerciais e encontram-se em processo de importação para a avaliação da potência inibitória e determinação do mecanismo de ação.

Palavras-chave: Enolase. Malaria Box. Triagem Biológica.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. Malaria fact sheet n. 94. 2015. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs094/en/>> . Acesso em: 03 set. 2015.

2 SPANGENBERG, T.; BURROWS, J. N.; KOWALCZYK, P.; MCDONALD, S.; WELLS, T. N. C.; WILLIS, P. The open access malaria box: a drug discovery catalyst for neglected diseases. **PloS One**, v. 8, n. 6, p. e62906, 2013. doi: 10.1371/journal.pone.0062906.

IC12

Estudos biofísicos da septina SmSEPT10G de *Schistosoma mansoni* na presença de forchlorfenuron, composto que afeta a dinâmica de septinas

FONTES, M. G.¹; ZERAIK, A. E.¹; DE MARCO, R.¹

marina.fontes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

SmSEPT10G corresponde ao domínio GTPásico da septina 10 do *Schistosoma mansoni*. (1) Estudos anteriores sugerem que o forchlorfenuron (FCF) interage com as septinas e acelera o processo de oligomerização das mesmas. (2) O objetivo geral deste projeto foi a utilização de técnicas biofísicas para caracterizar a interação de SmSEPT10G com FCF e avaliar a sua influência na oligomerização da septina. A SmSEPT10 também foi utilizada nos ensaios biofísicos e novas construções, SmSEPT10NG (domínios N-terminal e GTPásico) e SmSEPT10GC (domínios GTPásico e C-terminal) foram expressas e purificadas para a utilização em trabalhos futuros. SmSEPT10G foi expressa e purificada, segundo protocolos pré-estabelecidos. (3) Experimentos de termoforese em microescala e de espectroscopia de dicroísmo circular foram realizados para detectar interações entre o FCF e a proteína. Utilizaram-se técnicas de crosslinking químico e de espalhamento dinâmico de luz (DLS) para analisar os efeitos do FCF na oligomerização do domínio proteico. SmSEPT10 também foi submetida ao experimento de DLS. As novas construções SmSEPT10NG e SmSEPT10GC foram expressas no vetor pet28a e purificadas por cromatografias de afinidade e de exclusão molecular. As técnicas de crosslinking químico e de DLS, realizadas tanto com a SmSEPT10 e a SmSEPT10G, não mostraram a ação do FCF sobre a formação de oligômeros de septinas. O experimento de termoforese em microescala foi capaz de detectar uma interação entre a proteína e o forchlorfenuron, já a técnica de espectroscopia de dicroísmo circular não revelou o aumento da estabilidade da SmSEPT10G na presença de FCF. As novas construções apresentaram rendimento elevado na expressão e na purificação. Com base nos experimentos biofísicos realizados, foi possível determinar que apesar do FCF se ligar ao domínio SmSEPT10G, não foi observada influência do FCF na sua oligomerização. As novas construções da SmSEPT10 foram purificadas com sucesso e serão utilizadas para a verificação da influência dos domínios N e C terminais na oligomerização desta proteína e na ligação da mesma ao FCF.

Palavras-chave: Septina. *Schistosoma mansoni*. Forchlorfenuron.

Referências:

- 1 ZERAIK, A. E. et al. Septins of platyhelminths: identification, phylogeny, expression and localization among developmental stages of *Schistosoma mansoni*. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 7, n. 12, p. e2602-1-e2602-14, 2013.
- 2 IWASE, M. et al. Forchlorfenuron, a phenylurea cytokinin, disturbs septin organization in *Saccharomyces cerevisiae*. **Genes & Genetic Systems**, v. 79, n. 4, p. 199-206, 2004.

3 ZERAIK, A. E. et al. Crystal structure of a *Schistosoma mansoni* septin reveals the phenomenon of strand slippage in septins dependent on the nature of the bound nucleotide. **Journal of Biological Chemistry**, v. 289, n. 11, p. 7799-7811, 2014.

IC13

Cerâmicas condutoras de prótons à base de $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,52}R_{0,3}O_{9-\delta}$ ($R = Y, Nd, Sm, Gd$): preparação e propriedade

FRANCISCO, L. H.¹; RODRIGUES, J. E. F. S.¹; HERNANDES, A. C.¹

lucas.francisco@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A condução de prótons é um fenômeno físico observado em uma variedade de materiais cristalinos e não cristalinos. Entre eles encontram-se eletrólitos cerâmicos, com aplicação nas chamadas células a combustível de óxido sólido, SOFC, fontes alternativas de energia limpa e renovável. (1) Sendo o $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,52}Y_{0,3}O_{9-\delta}$, (de estrutura cristalina tipo perovskita) o material que melhor combina as propriedades de condução protônica e estabilidade química entre os óxidos sólidos (2), este projeto objetiva o estudo do efeito da substituição do Ítrio em sua composição pelos elementos Nd , Sm e Gd . Tais elementos possuem raio iônico próximo ao do Ítrio e a mesma valência, mas apresentam diferentes polarizabilidades. Assim, espera-se observar a influência na condutividade do ambiente no qual os defeitos protônicos estão inseridos. Estudos de caracterização são realizados de forma a correlacionar os efeitos dos íons substituintes nas características estruturais, morfológicas e elétricas do material. Para a análise, pós de $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,52}R_{0,3}O_{9-\delta}$ ($R = Y, Nd, Sm, Gd$) foram sintetizados via reação em estado sólido. A evolução estrutural dos compostos foi estudada por difração de raios-x realizada em materiais frutos de diferentes parâmetros de síntese. Os pós sintetizados foram então conformados e sinterizados, resultando em corpos cerâmicos densos. À fabricação das cerâmicas seguiu sua caracterização elétrica por espectroscopia de impedância, em uma faixa de 100mHz a 1GHz. A caracterização estrutural revelou a existência de ordenamento estrutural do sítio B na estrutura perovskita (ABO_3) dos materiais, sendo que a formação da fase final se dá com o aparecimento de um ordenamento 1:1 seguido pela formação de uma fase desordenada. O processo de desordem na estrutura cristalina dessa classe de materiais está relacionado à formação de defeitos protônicos e consequente aumento na condutividade. (3) Os espectros de impedância das amostras cerâmicas mostraram que as propriedades condutivas do material foram alteradas na substituição pelos elementos terras raras, demonstrando a influência da polarizabilidade dos átomos da rede na condutividade protônica. A dependência das propriedades elétricas com a temperatura mostrou que a condução se dá por um processo termicamente ativado e permitiu calcular as energias de ativação relacionadas para as quatro composições testadas. Os resultados para o caso $R = Y$ reproduziram os da literatura. (2) Próximas etapas do projeto envolvem a determinação das propriedades elétricas do material em atmosfera de hidrogênio gasoso e vapor de água, determinar seu grau de estabilidade química em altas temperaturas e a observação de sua microestrutura via microscopia eletrônica de varredura, correlacionando as propriedades elétricas, estruturais e microestruturais.

Palavras-chave: Perovskita. Eletrólito. SOFC.

Referências:

1 SOUZA, E. C. C.; MUCCILLO, R. Properties and applications of perovskite proton conductors.

Materials Research, v. 13, n. 3, p. 385-394, 2010.

2 WANG, S. et al. Novel chemically stable $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,82-x}Y_xO_{9-\delta}$ proton conductor: improved proton conductivity through tailored cation ordering. **Chemistry of Materials**, v. 26, n. 6, p. 2021-2029, 2014. doi: 10.1021/cm403684b.

3 DU, Y.; NOWICK, A. S. Structural transitions and proton conduction in nonstoichiometric $A_3B'B''O_9$ perovskite-type oxides. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 77, n. 11, p. 3033-3039, 1995. doi: 10.1111/j.1151-2916.1995.tb09079.x.

IC14

A sinergia na engenharia de ecossistemas

FRANCO, C.¹; FONTANARI, J. F.¹

caroline.franco@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de engenharia de ecossistemas trata da modelagem matemática da dinâmica populacional de organismos capazes de modificar fisicamente recursos naturais em seus habitats. (1) Exemplos clássicos são castores ao construir seus diques, formigas modificando a estrutura do solo ao construir seus formigueiros ou recifes de corais. Estes animais ou plantas não apenas alteram o espaço físico em que coexistem com outras espécies visando otimizar suas chances de sobrevivência, mas também provocam mudanças que podem perdurar por várias gerações, trazendo inclusive consequências no processo evolutivo. Esta área de estudo é relativamente recente (1) se comparada à modelagem de sistemas predador-presa (iniciada com o modelo de Lotka-Volterra, publicado em 1926) e, portanto, os modelos ainda são um tanto primitivos. No entanto, o conceito de engenharia de ecossistemas é particularmente promissor se pensarmos em aplicações ecológicas. O conhecimento dos efeitos de variáveis abióticas em comunidades bióticas pode facilitar, por exemplo, a restauração de ecossistemas e contrabalancear as consequências da ação humana. (2) Neste estudo propusemos uma parametrização do efeito da sinergia em uma comunidade de engenheiros de ecossistemas, visando determinar se esta garante sua permanência. Sinergia se refere à situação em que a interação entre os membros de uma comunidade produz um efeito maior do que a soma dos efeitos individuais. Para esse fim usamos uma variante do modelo de Gurney & Lawton (3), que descreve a interação entre engenheiros e habitats. Neste, o número de habitats entra de três formas distintas - virgem (V), utilizável (H) e degradado (D) - como uma variável dinâmica, juntamente com o número de engenheiros (E). Em nosso modelo, a taxa de transformação de habitats virgens em utilizáveis é dada por $p(V, E) = (\alpha + \beta(E/T)^\gamma)V/T$, onde utilizamos a população e o número de habitats virgens na forma normalizada em relação ao número total de habitats, T . α corresponde à taxa no caso de engenheiros não cooperativos e β no caso de engenheiros cooperativos não sinérgicos. Aqui também introduzimos o parâmetro de sinergia: γ . $\gamma < 1$ corresponde à situação de sinergia negativa e $\gamma > 1$ à situação de sinergia positiva. Foi feita a análise de estabilidade do sistema dinâmico e pontos de equilíbrio foram determinados numericamente, assim como suas regiões de estabilidade. Verificamos a influência do parâmetro de sinergia γ no comportamento das soluções de equilíbrio (pontos fixos ou ciclos limite). No limite de sinergia positiva obtivemos que a população de engenheiros no equilíbrio aumenta continuamente à medida que γ decresce do valor $\gamma = 1$ (ausência de sinergia) até $\gamma = 0$ (máxima sinergia positiva). Já quando γ aumenta a partir de $\gamma = 1$, a população diminui continuamente e para $\gamma \gg 1$ a solução reduz-se à do caso não cooperativo ($\beta = 0$). Concluímos que a sinergia positiva elimina os ciclos-limites ao trazer estabilidade para a população de engenheiros no equilíbrio. Além disso, esse regime protege os engenheiros da extinção, que poderia advir de perturbações durante os mínimos muito próximos de zero dos ciclos limite.

Palavras-chave: Engenharia de ecossistemas. Sinergia. Dinâmica de populações.

Referências:

- 1 JONES, C. G.; LAWTON, J. H.; SHACHAK, M. Organisms as ecosystem engineers. **Oikos**, v. 69, n. 3, p. 373-386, 1994.
- 2 HASTINGS, A. et al. Ecosystem engineering in space and time. **Ecology Letters**, v. 10, n. 2, p. 153-164, 2007.
- 3 GURNEY, W. S. C.; LAWTON, J. H. The population dynamics of ecosystem engineers. **Oikos**, v. 76, n. 2, p. 273-283, 1996.

IC15

Estudo da mineralogia do pegmatito Volta Grande - Nazareno, MG

GARCIA, G. S.¹; ANDRADE, M. B. de¹

gabriel2.garcia@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos – A caracterização de minerais raros é muito importante para a compreensão da síntese de novos compostos inorgânicos e de suas propriedades físicas. Por exemplo, muitos desses minerais são fonte de tântalo e nióbio, metais fundamentais na produção de artefatos de alta tecnologia, atraindo grandes investimentos da indústria de mineração. Apesar da intensa exploração sobre as reservas minerais brasileiras, a contribuição nacional na caracterização dessas espécies é muito pequena: apenas 0,01% das espécies descritas na literatura e validadas pela Associação Mineralógica Internacional (IMA) são consideradas brasileiras. Com o intuito de contribuir para sanar esta deficiência, este projeto do Centro de Caracterização Espécies Minerais (CCEM) se propõe a caracterizar e catalogar espécies minerais raras originárias do pegmatito Volta Grande, MG utilizando a técnica de difração de raios X. – **Métodos/Procedimentos** – O método de difração de raios X por monocristal exige uma preparação prévia da amostra. O procedimento é simples, mas muito delicado. A princípio, dentre os vários cristais da amostra, deve-se selecionar aquele com as características que favorecem uma boa difração, a saber: pequenas dimensões, homogeneidade e ausência de reentrâncias. Dispondo de um bom cristal para a análise, este deve ser colado na ponta de uma fibra de vidro, anteriormente fixada dentro de um suporte de latão. Tudo isso deve ser feito com o auxílio de um microscópio óptico de luz polarizada. Feita a preparação da amostra, ela deve ser fixada numa cabeça goniométrica e posicionada no difratômetro. Finalmente, após a centralização da posição da amostra, coletam-se os dados para a obtenção dos parâmetros cristalográficos. – **Resultados** – Nesta primeira etapa, foram analisados minerais do grupo da microlita. Os minerais ocorrem como octaedros de várias colorações e com dimensões de aproximadamente 1 mm. Para a coleta de difração de monocristal foram selecionados fragmentos de cristal entre 100 e 120 micrometros, e foram obtidos os seguintes resultados: Difratômetro Kappa CCD Enraf-Nonis (Mo K α λ = 0.071073 nm). Cúbico, Fd-3m, a = 1.04181(18) nm, V = 1.13075 (11) nm³, Z = 8. – **Conclusões** – Comparando-se os resultados com informações da base de dados ICSD (Inorganic Crystal Structure Database) e RRUFF da Universidade do Arizona (<http://rruff.info/>), pode-se concluir que as amostras podem ser identificadas como fluorcalciomicrolita¹.

Palavras-chave: Raios X. Cristalografia. Fluorcalciomicrolita.

Referências:

1 ANDRADE, M. B. et al. Fluorcalciomicrolite, $(Ca, Na, \square)_2Ta_2O_6F$, a new microlite-group mineral from Volta Grande pegmatite, Nazareno, Minas Gerais, Brazil. **Mineralogical Magazine**, v. 77, n. 7, p. 2989-2996, 2013. doi: 10.1180/minmag.2013.077.7.08.

IC16

Nature of science as seen by nobel prize laureates

LICIO, J. G.¹; SILVA, C. C.¹

jguilherme137@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

This research presents an analysis of nature of science (NoS) contents conveyed by speeches of Nobel Prize laureates in scientific areas. The choice for this material is due to the prestige that the Nobel Prize has achieved among the laymen and the scientific public. Due to the power that Nobel Prize laureates have to influence the public understanding about scientific practice (1), also justify the study of their lectures. The official Nobel sources are of great interest and give some interesting insights about how scientists understand the development of science, because they can be interpreted as the official view of scientific community about which scientific works are the most important and relevant on different periods in certain areas. There are studies about the internal organization and politics of the Nobel Prize (2) and on the history and development of the Prize. (1- 2). However, there is a lack of studies on the analysis of the official Nobel lectures - which are available for free on Nobel Prize official website (3) - from the perspective of NoS contents and how scientists convey those ideas. Since the foundation of Nobel Prize, in 1901, important historical events took place such as two Great Wars and the Cold War. Thus it is possible to analyze how the understanding of eminent scientists about science change in different historical, sociological and political contexts. In addition, it has been often pointed by educators that understanding nature of science is an important topic on formation of critical teachers and, we add, other professionals in scientific areas. Thus, it is relevant to find ways to discuss about NoS on undergraduate science courses.

Keywords: Nature of science. Nobel prize. Science teaching.

Referências:

- 1 KRAGH, H . Nobel physics. In: KRAGH, H . **Quantum generations:** a history of physics in the twentieth century. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2002. 427-440 p.
- 2 FRIEDMAN, R. M. Nobel physics prize in perspective. **Nature**, v. 292, p. 793-798, 1981. doi: 10.1038/292793a0.
- 3 NOBEL FOUNDATION **Official Nobel Lectures**. Available on:< <http://www.nobelprize.org/>>. Access on: September 6th, 2015..

IC17

Development and characterization of multifunctional nanoparticles using liposomal coating and transferrin for use in nanomedicine

LINS, P.¹; ZUCOLOTTO, V.¹; CANCINO, J.¹

ppincela@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The development of multifunctional systems with individual properties acting in a coordinated manner has been shown to be relevant in the search for methods of early diagnosis and more effective treatments. Systems based on gold nanoparticles is known for their unique optical and electronic properties and the possibility of incorporation of different compounds in a single particle. Special attention has been given to multifunctional and/or theranostic nanomaterials.(1) Recently, great interest has been to develop nanomaterials with high specificity to cancer cells to diagnostic and treatment, as well as low toxicity. (2) This research is motivated by the development of multifunctional nanoparticle based on the system liposome-transferrin, which is not well explored in the literature for diagnosis and treatment of cancer cells. Gold nanoparticles will be coated with liposomes such as DPPC and DPPG, followed by conjugation with the protein transferrin to confer greater selectivity to cancer cells.(3) The multifunctional nanoparticles will be characterized by spectroscopic techniques after each modification. It is expected that the combination of nanomaterials and biomolecules will significantly increase treatment efficacy and bioavailability in the biological system due to the enhanced biocompatibility, permeability and retention effect of these nanomaterials.

Keywords: Multifunctional nanoparticles. Liposomes. Transferrin.

Referências:

- 1 LAMMERS, T. et al.. Theranostic nanomedicine. **Account of Chemical Research**, v. 44, n. 10, p. 1029-1038, 2011. doi: 10.1021/ar200019c.
- 2 PEER, D. et al.. Nanocarriers as an emerging platform for cancer therapy. **Nature Nanotechnology**, v. 2, p. 751-760, 2007. doi: 10.1038/nnano.2007.387.
- 3 TORTORELLA, S.; KARAGIANNIS, T. C.. Transferrin receptor-mediated endocytosis: a useful target for cancer therapy. **Journal of Membrane Biology**, v. 247, n. 4, p. 291-307, 2014. doi: 10.1007/s00232-014-9637-0.

IC18

Portas lógicas quânticas para sistemas de óptica linear

MARTINS, G. F.¹; BRITO, F.¹

gabriela.fernandes.martins@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Computação Quântica desperta a atenção da comunidade científica por ser uma possível ferramenta para a solução de problemas tidos como intratáveis pela computação clássica. Assim, dispositivos supercondutores têm-se destacado na busca por sistemas que permitam a implementação de qubits, análogo quântico do bit. Considerando-se este cenário, o objetivo deste projeto é a realização de um estudo dos principais conceitos associados à área da Computação Quântica, com ênfase em qubits supercondutores e na implantação de portas lógicas quânticas nestes dispositivos. (1) Inicialmente realizou-se um estudo dirigido de Mecânica Quântica em que se estudaram os fundamentos necessários para a concretização do projeto. Também se realizou uma breve introdução à Teoria da Supercondutividade, abordando-se, entre outros, a caracterização de junções Josephson e a formação de pares de Cooper. Então, pôde-se dar início à análise da dinâmica de dispositivos supercondutores, entre estes, SQUIDS e CPBs. (2) Assim, realizou-se o processo de quantização deste último e diagonalizou-se o Hamiltoniano do sistema. Além disso, compararam-se as razões entre os gaps de energia entre estados para diferentes aproximações do sistema, caracterizadas pela quantidade de níveis energéticos. Por último, de modo a se compreender a implementação de operações lógicas em qubits, realizou-se o cálculo do operador evolução temporal, utilizando-se séries infinitas e também o Teorema da Decomposição Espectral, associado a diferentes Hamiltonianos. Deste modo puderam-se determinar quais portas lógicas quânticas de um qubit poderiam ser geradas e se estes Hamiltonianos analisados possuem alguma relação com os associados aos qubits supercondutores estudados. Verificou-se através da análise dos gaps de energia que para certos intervalos de variação do parâmetro externo de controle e certas características do dispositivo, o sistema pode ser utilizado como um qubit. (3) Compreendeu-se que a variável que diferencia experimentalmente os dois autoestados, está associada à medida de carga do sistema, sendo, portanto, o dispositivo denominado qubit de carga, que se distingue de um qubit de fluxo. Além disso, verificou-se que evolução após um dado tempo dos Hamiltonianos analisados em um sistema de dois níveis pode gerar as portas lógicas X e Hadamard. Estas são de extrema importância, já que são constituintes essenciais de conjuntos universais de portas lógicas, com os quais é possível produzir qualquer operação lógica. Assim, com a realização destes estudos compreendeu-se a necessidade da presença de junções Josephson em dispositivos supercondutores para que estes possam atuar como qubits. Além disso, analisou-se como a alteração do Hamiltoniano associado a um dado qubit, permite a implementação de diversas portas lógicas essenciais para a concretização da Computação Quântica.

Palavras-chave: Computação quântica. Portas lógicas. qubits supercondutores.

Referências:

1 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I.L.. **Quantum computation and quantum information**. New York:

Cambridge University Press, 2010. 1-111,399-416 p.

2 MAKLIN, Y.; SCHON, G.; SHNIRMAN, A.. Quantum-state engineering with Josephson-junction devices. **Reviews of Modern Physics**, v. 73, p. 357-368, 2001. doi: 10.1103/RevModPhys.73.357.

3 NAKAMURA, Y.; PASHKIN, Y. A.; TSAI, J. S.. Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box. **Nature**, v. 398, p. 786-788, 1999. doi: :10.1038/19718.

IC19

Análise de leite por refletância difusa - sondaLeite

MATTOS, V. S.¹; MELO, W. L. B.²

vicente.mattos@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

A atividade leiteira no Brasil apresenta grande importância econômica e social. O Brasil é o quinto produtor mundial de leite, produziu mais de 32 milhões de litros em 2011. Produto muito sujeito a fraudes, contaminação e degradação. Não há uma metodologia segura para as análises do leite. (1) Neste trabalho, utilizou-se a espectrofotometria por refletância para alcançar um método de análise do leite, quando a estabilidade e adulteração por água. Como o leite in natura é uma substância espalhadora de luz devido à sua composição, logo, a técnica de reflectância é adequada para análise. (2) Para isto, criou-se um dispositivo portátil denominado SondaLeite, um sistema que usa LEDs como fonte de luz monocromática associados a uma lente plano-convexa tendo no foco um fotodetector. O instrumento usa oito pares LEDs com comprimentos de onda desde o violeta até infravermelho próximo. (3) As amostras foram seis marcas de leite industrializado, duas do tipo A e quatro do tipo UHT (leite de caixa) sendo nas condições de integral, semidesnatado e desnatado, e duas de leite cru. Os procedimentos foram: inicialmente, leitura espectral das amostras de referência - Teflon e água destilada - seguida das amostras de leite. As medições foram em amostras sem diluição e diluídas em água destilada, seguindo o intervalo de 10 a 10% de água, de 10 a 90%. Usou-se cerca de 50ml de cada amostra para as medições. Este processo se repetiu, geralmente, por 4 dias. Foi realizado o procedimento de acidificação artificial da amostra com a adição de ácido clorídrico e medição em curtos intervalos de tempo. Usou-se a função de Kubelka-Munk $KM = (1 - R^2)/(2R)$ para analisar os dados, sendo $R = (sinaldaamostra - sinaldeágua)/(sinaldoteflon - sinaldaágua)$. Esta mostra uma relação entre absorção e espalhamento, e os espectros obtidos foram analisados. Observou-se que na região azul-violeta, as amostras de leite cru apresentaram a banda mais alta que as demais, enquanto as de leite longa vida foram mais baixas. As amostras do tipo A e leite cru, a banda IR cresce significativamente entre o primeiro e os outros dias, mas as amostras de leite longa vida (UHT) forneceram espectros com sentido decrescente. Notou-se que a banda IR é mais sensível à perda de componentes do leite. Os espectros obtidos para a acidificação artificial corresponderam ao mesmo sentido daqueles obtidos por degradação natural. Nas análises dos leites diluídos em água, notou-se que maior diluição da amostra levou a menor espalhamento devido à menor quantidade de componentes espalhadores. As razões percentuais dos valores de KM entre a amostra não diluída e cada uma das demais diluições, em 605 e 591 nm, foram observadas correlações de 0,994 e 0,9935, respectivamente. Portanto, o SondaLeite é capaz de monitorar o estado de degradação e de adulteração de leite.

Palavras-chave: Espectroscopia. Leite. Sondaleite.

Referências:

1 BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Instrução Normativa SDA n.68, 12 de dezembro de 2006. Disponível em: <<http://extranet.agricultura.gov.br/sislegis-consulta/consultarLegislacao.do?operacao=visualizar&id=17472>>. Acesso em: 08 mar. 2015.

2 MICHALSKI, M-C.; BRIARD, V.; MICHEL, F. Optical parameters of milk fat globules for laser light scattering measurements. **Le Lait**, v. 81 , n. 6, p. 787-796, 2001.

3 MARTINS, R.C. et al. Monitoring goat milk quality during pasteurisation and ohmic treatment using UV-VIS-SWNIR spectroscopy. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM FOOD AND AGRICULTURAL PRODUCTCS, 4., 2007, Naples. **Proceedings...** [S.l.]: [s.n.], 2007, [CD-ROM].

IC20

Análise estrutural da enzima superóxido dismutase de *Xanthomonas citri*

MENDONÇA, D. C.¹; GOTO, L. S.²

deborah.mendonca@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR

Objetivos A variedade bacteriana *Xanthomonas citri* subsp. *citri* (Xac) é um dos agentes infecciosos do cancro cítrico, doença que causa grandes prejuízos ao setor citrícola devido à queda na produtividade e qualidades dos frutos, e à ausência de medidas eficazes de controle e cura. A Superóxido Dismutase (SOD) é uma metaloenzima que catalisa a dismutação do ânion superóxido em peróxido de hidrogênio e oxigênio.(1) A expressão da SOD em *Xanthomonas* é atípica e demonstra maiores concentrações desta enzima durante a fase inicial de instalação infecciosa em contraste com seu máximo potencial de proteção contra substâncias oxidativas encontrado na fase estacionária de crescimento, indicando papel importante na interação planta-patógeno.(2) Tal papel pode ser atribuído a uma resposta ao ataque oxidativo das plantas durante a instalação infecciosa. Ainda não existem relatos de estudos estruturais de superóxido dismutases de Xac. Com base nisso, o objetivo desse trabalho foi iniciar esse estudo por meio de ensaios cristalográficos. **Métodos/Procedimentos** Foram realizadas expressões heterólogas da proteína SOD a partir do inóculo da linhagem de *E. coli* BL21 contendo os vetores de expressão. A indução foi realizada à 18°C sob agitação overnight. A partir das células coletadas e lisadas foi realizada uma análise de solubilidade da proteína, utilizando eletroforese em gel de poliacrilamida SDS-PAGE 15%. Foram realizadas expressões em larga escala para purificação da SOD por cromatografia de afinidade utilizando coluna de níquel e posteriormente uma diálise para a retirada de imidazol da amostra. Além disso foi retirada a cauda de histidina N-terminal através da protease trombina e posteriormente realizando mais uma purificação por cromatografia de exclusão molecular. A proteína purificada foi então submetida à ensaios de cristalização que estão em andamento. **Resultados** A expressão heteróloga resultou na produção da proteína SOD de maneira solúvel. Foi obtido um adequado grau de pureza após as cromatografias de afinidade, diálise e exclusão molecular, resultado analisado através do conhecimento de sua massa molecular. A proteína obtida indicou um bom rendimento e foi submetida à ensaios de cristalização. Até o momento não obtivemos cristais para os estudos estruturais propostos. **Conclusões** A partir purificação já padronizada da SOD, será possível realizar novos ensaios de cristalização para o estudo estrutural e aplicação de outras técnicas, como a análise quantitativa da cromatografia de exclusão molecular, gel nativo e espalhamento dinâmico de luz para a confirmação de seu estado oligomérico.

Palavras-chave: *Xanthomonas citri*. Cancro cítrico. Superóxido dismutase.

Referências:

1 FRIDOVICH, I. Superoxide dismutases.. **Advances in Enzymology and Related Areas of Molecular**

Biology, v. 41, p. 35-97, 1974.

2 LOPRASERT, S. et al. Regulation of the oxidative stress protective enzymes, catalase and superoxide dismutase in *Xanthomonas*—a review. **Gene**, v. 179, n. 1, p. 33-37, 1996.

IC21

Quantum gas machine for dysprosium atoms

MIOTTI, M. P.¹; TONIN, Y. R.²; HENN, E. A. L.¹

marcos.miotti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Física - UFSCAR

Quantum gases (a.k.a. ultracold gases) are metastable phases of matter, in which a low-density gas is cooled near to absolute zero temperature and remains as a gas for a while. (1) In this condition, quantum phenomena are probed at macroscopic scale and many physical systems can be simulated, which makes quantum gases interesting to atomic physics researches. (2) Ultracold gases are usually made of alkali atoms, which show isotropic short-range interactions. However, in recent years, quantum gases of magnetic atoms and of heteronuclear molecules were achieved, which present anisotropic long-range dipole-dipole interactions. (1, 3) When compared to alkali-metal gases, those dipolar quantum gases predict the rising of new and exclusive phenomena, besides simulations of new physical systems, such as supersolids. (3) For those reasons, we planned a quantum gas machine for dysprosium, which is the most magnetic element in periodic table and presents the strongest interactions. Our machine is composed basically by a vacuum system, which creates the propitious environment for low-density gases, a laser system, that uses blue and orange light to cool and trap atoms, an effusion cell, used to make dysprosium samples gaseous, a Zeeman slower, which allows laser cooling of atoms, and a trap chamber, where atoms will be captured after leaving the Zeeman slower. We will present the quantum gas machine's design, the currently-acquired components and the specifications from every apparatus' part. We intend to finish the machine's construction and start our research activities until December 2015.

Keywords: Dysprosium. Quantum gases. Atomic physics.

Referências:

- 1 JERVIS, D.; THYWISSEN, J. H. Making an ultracold gas. In: TÖRMÄ, P.; SENGSTOCK, K. (Eds). **Quantum gas experiments**: exploring many-body states. Singapore: World Scientific, 2014. 340 p.
- 2 BLOCH, I.; DALIBARD, J.; NASCIMBÈNE, S. Quantum simulations with ultracold quantum gases. **Nature Physics**, v. 8, p. 267-276, 2012. doi: 10.138/NPHYS2259.
- 3 TONIN, Y. R. et al.. Towards a dipolar quantum gas of Dysprosium atoms. In: BRAZILIAN PHYSICAL SOCIETY MEETING, 35, ENFMC, 2015, Foz do Iguaçu, PR. **Abstract book**... São Paulo: SBF, 2015, p.81.

IC22

Campo magnético para sintonização de ressonâncias de Feshbach em amostras ultrafrias: testes e caracterização

MONTEIRO, V. M.¹; CASTILHO, P. C. M.¹; PEÑAFIEL, E. P.¹; VIVANCO, F. A. J.¹; BAGNATO, V. S.¹; FARIAS, K. M.¹

vitor.marquioni.monteiro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ressonâncias de Feshbach em amostras ultrafrias e mesmo em condensados de Bose-Einstein permitem mudar a interação entre os átomos condensados, por meio da aplicação de campo magnético, o qual aproxima a energia de canais abertos de interação com a de canais fechados. (1-2) No projeto desenvolvido, confeccionamos um par de bobinas em configuração Helmholtz que pudesse proporcionar o campo uniforme necessário para a sintonização dessas ressonâncias em amostras de sódio e potássio. Também desenvolvemos um sistema de resfriamento que pudesse garantir o correto funcionamento do par sem o superaquecimento do mesmo. O par de bobinas foi simulado numericamente de modo a garantir que o campo necessário fosse atingido. Foram então enroladas em fio de cobre esmaltado e coladas com resina epóxi de alta condutividade térmica e as câmaras de resfriamento fabricadas em material polimérico. O resfriamento se dá pela imersão das bobinas nas câmaras, nas quais circula água resfriada a 14°C. O campo sobre o eixo do par foi medido em configuração Helmholtz e anti-Helmholtz e comparado com os valores teóricos simulados. Os testes de resfriamento foram feitos por meio da medida da resistência das bobinas, a qual deve aumentar com o aumento da temperatura, dado pela dissipação de potência no fio mediante passagem de corrente. O par atinge os valores de campo esperados e necessários para a sintonização das ressonâncias de Feshbach. O sistema de resfriamento ainda precisa passar por outros testes para garantirmos o correto funcionamento do conjunto.

Palavras-chave: Ressonâncias de Feshbach. Átomos Frios. Condensados de Bose-Einstein.

Referências:

1 INOUE, S. et al. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. **Nature**, v. 392, p. 151-154, 1998. doi: 10.1038/32354.

2 CHIN, C. et al. Feshbach resonances in ultracold gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 82, n. 2, p. 1225-1286, 2010.

IC23

Síntese, caracterização e aplicação de hidrogéis de quitosana-polianilina

OTA, R. T.¹; FERNANDES, E. G. R.¹

rodolfo.ota@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Objetivos: O presente projeto de pesquisa objetivou o desenvolvimento de filmes de hidrogel baseados em Quitosana (Chi), Poli(álcool-Vinílico) (PVA) e Polianilina (Pani), visando sua utilização como suporte para crescimento e diferenciação celular. (1) **Métodos/Procedimentos:** Primeiramente, foi sintetizado um filme de Quitosana-Poli(Álcool Vinílico). Para isso, foram preparadas soluções de Chi de alto peso molecular em ácido acético (1%) e PVA as quais foram misturadas, em variadas proporções, sob agitação intensa e banho maria (ca. 95 °C) (1h), com posterior adição de Ácido cítrico, para reticulação da rede polimérica (1h). Por fim, após esfriamento natural, volumes do gel reticulado foram colocados em placas de Petri para secagem em estufa. Para a incorporação da Pani ao hidrogel, ele foi sintetizado utilizando a mesma solução anterior, com a diferença da adição de: Anilina Hidroclorada, Persulfato de Amônio e Ácido Fítico, deixados sob agitação intensa a 0°C (1h) e deixadas para secar em estufa. Foram realizados ensaios de intumescimento, estudos de espectroscopia de infravermelho, ensaios eletroquímicos, ensaios de voltametria cíclica, cronoamperometria e o estudo da resposta dos filmes de Chi-PVA-Pani a concentrações de glicose. **Resultados:** Os filmes de Chi-PVA mostraram boa estabilidade, aparente resistência mecânica e capacidade de intumescimento de 400% em solução PBS (pH 7,0; 0,1 M) a 37 °C. Os filmes de Chi-PVA-Pani apresentaram as mesmas características acima. Não observou-se perda de massa do hidrogel após os processos de intumescimento e secagem do filme, mostrando que a Pani foi incorporada. A resposta cronoamperométrica do hidrogel contendo Pani, após adição de glicose à solução tampão (PBS, 0,1 M, pH 7,4) indica que filme possui alguma sensibilidade à glicose devido à presença de Pani provavelmente devido a algum mecanismo químico ligado à Reação de Maillard pela presença de grupos carboxila e amina, presentes no hidrogel). **Conclusões** Os hidrogéis apresentaram boas características físico-químicas com aparente resistência mecânica. Uma etapa posterior é o estudo citotóxico desses filmes e, mediante a aplicação de campo elétrico externo, estudar o crescimento e diferenciação de células cardíacas. (2) Foi possível observar que esses filmes possuem relativa sensibilidade à glicose, importante molécula na obtenção de energia celular.

Palavras-chave: Quitosana. Polianilina. Hidrogéis.

Referências:

- 1 DISPENZA, C. et al. E-beam crosslinked, biocompatible functional hydrogels incorporating polyaniline nanoparticles. **Radiation Physics and Chemistry**, v. 81, n. 9, p. 1456-1459, 2012.
- 2 FERNANDES, E. G. R.; ZUCOLOTTO, V. ; QUEIROZ, A. A. A.. Electrospinning of hyperbranched poly-L-lysine/polyaniline nanofibers for application in cardiac tissue engineering. **Journal of**



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Macromolecular Science A, v. 47, n. 12, p. 1203-1207, 2010. doi: 10.1080/10601325.2010.518847.

IC24

Estudo cristalográfico de minerais da região de Volta Grande (MG)

QUEIROZ, A. A. A. E.¹; ANDRADE, M. B.¹; ELLENA, J.¹

alfredo.queiroz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Comparada com a diversidade de espécies minerais de outros países, há poucas ocorrências brasileiras completamente caracterizadas, sendo apenas 67 aprovadas pela Associação Mineralógica Internacional (IMA). (1) O objetivo deste trabalho é contribuir para a caracterização de espécies minerais raras realizando estudos de amostras provenientes da região de Volta Grande, Minas Gerais. Com o intuito de contribuir para a caracterização de espécies minerais raras, este projeto se propõe a realizar estudos estruturais usando difração de raios-X de amostras monocristalinas do supergrupo pirocloro provenientes de Volta Grande (MG), Brasil. As amostras foram caracterizadas utilizando um difratômetro de monocristal Kappa-CCD (Enraf-Nonius) com anodo de molibdênio emitindo radiação no comprimento de onda 0.71703 Å, monocromatizada por grafite. Observou-se o padrão de difração obtido para as duas amostras. Os estudos estruturais das mesmas mostraram que uma das amostras apresenta parâmetros de cela $a = 4.7027 \text{ Å}$, $b = 4.7102 \text{ Å}$, $c = 3.1634 \text{ Å}$ cristalizando no sistema tetragonal. A comparação dos dados obtidos com os listados na base de dados ICSD- Inorganic Crystal Structure Database (adicionando uma tolerância de 1% nas medidas) mostra que o composto medido corresponde a um cristal de Rutilo, o que se corresponde claramente com a coloração e a forma observadas na amostra. (2) O padrão de difração obtido para a segunda amostra apresenta parâmetros de cela: $a = 10.39 \text{ Å}$, $b = 10.39 \text{ Å}$, $c = 10.39 \text{ Å}$. Nesse caso, os dados obtidos indicam um sistema cristalino cúbico. Tais resultados, junto com a coloração e forma da amostra estão em boa concordância com os dados da literatura para o cristal de fluorcalciomicrolita. (3) Neste trabalho determinou-se que as amostras analisadas são rutilo e fluorcalciomicrolita por meio da difração de raios-X. Com a experiência adquirida neste treinamento, pretende-se dar continuidade ao trabalho; caracterizando-se as amostras de hainita.

Palavras-chave: Volta Grande. Minerais. Difração de raios-x.

Referências:

- 1 ATENCIO, D. The discovery of new mineral species and type minerals from Brazil. **Brazilian Journal of Geology**, v. 45, n. 1, p. 143-158, 2015.
- 2 BALTAR, C. A. M.; SAMPAIO, J. A.; ANDRADE, M. C. Minerais de titânio. In: LUZ, A. B.; LINZ, F. F. **Rochas e minerais industriais**. Rio de Janeiro: CETEM/MCT, 2005. 655-676 p.
- 3 ANDRADE, M. B.; ATENCIO, D.; PERSIANO, A. I. C.; ELLENA, J. Fluorcalciomicrolite, $(\text{Ca}, \text{Na}, \text{--})_2\text{Ta}_2\text{O}_6\text{F}$, a new microlite-group mineral from Volta Grande pegmatite, Nazareno, Minas Gerais,



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Brazil. **Mineralogical Magazine**, v. 77, n. 7, p. 2989-2996, 2013.

IC25

Caracterização biofísica e estrutural da hidrolase de glicosídeo da família GH32 de *Bacillus licheniformis*

ROCHA, T. S.¹; LIMA, M. Z. T.¹; MUNIZ, J. R. C.¹

tamiris.rocha@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As hidrolases de glicosídeos são proteínas caracterizadas por degradarem oligo e polisacarídeos que conferem uma abundância de funções biológicas aos carboidratos, através de reações desencadeadas a partir da quebra dos polissacarídeos. A enzima alvo deste estudo, descrita como sacarose-6-fosfato hidrolase, é pertencente a família denominada GH32 pois as frutossiltransferases desta família podem sintetizar frutanos a partir da hidrólise da sacarose agrupando os monômeros da frutose. Os frutanos possuem uma variada aplicação na indústria alimentícia por serem considerados probióticos e promoverem o crescimento benéfico das bactérias intestinais, além disso, promovem absorção de Ca^{2+} no cólon, podendo nesse caso agir como um anticarcinogênico (1) e podem ser também empregados como adoçantes para alimentos funcionais. A enzima em questão é sintetizada pelo *Bacillus licheniformis* ATCC 14580, uma bactéria gram-positiva formadora de endósporos e anaeróbia facultativa, que está distribuída pelo meio ambiente como um saprófito, devido à sua capacidade de desnitrificação dos compostos orgânicos em decomposição no solo, tornando-se assim um agente natural de controle biológico. (2) Sendo assim, caracterizar biofísica e estruturalmente, verificando a produção de frutanos a partir da frutosilação dos monômeros da frutose pela sacarose-6-fosfato hidrolase, confere a essa enzima as aplicações biotecnológicas associadas a sua característica catalítica, e as relacionadas aos frutooligosacarídeos (frutanos) citadas a pouco. Para tanto foram realizadas a clonagem, expressão do gene codificador da proteína em questão e a purificação da mesma pelo método LIC (do inglês: *Ligation-Independent Cloning*) (3), a clivagem da cauda de histidinas fusionada à proteína pela protease TEV e a certificação da adequada realização do experimento através da análise em gel de poliacrilamida. Destes experimentos foi percebida a importância do adequado manuseio da bactéria transformada para expressão do gene e os cuidados a serem tomados durante as etapas de purificação. Ainda serão realizados os ensaios enzimáticos que caracterizarão biofisicamente as melhores condições de atividade da enzima - como pH, concentração de enzima, tempo de reação e temperatura - e permitirão avaliar a capacidade de polimerização ou não de frutanos, visto que é necessária a proteína pura para o procedimento destes experimentos, bem como para os futuros testes de cristalização que objetivam a formação dos cristais deste polímero para posterior resolução da estrutura através da difração do cristal em Raio X. Sendo assim, o presente estudo busca experimentalmente caracterizar a sacarose-6-fosfato hidrolase nos termos descritos, mas já forneceu a padronização das condições necessárias para bem expressá-la e purificá-la.

Palavras-chave: Hidrolase de glicosídeo. Frutossiltransferase. Frutooligosacarídeos.

Referências:

1 VERHAEST, M. et al. X-ray diffraction structure of a plant glycosyl hydrolase family 32 protein:

fructan 1-exohydrolase IIa of *Cichorium intybus*. **The Plant Journal**, v. 41, n. 3, p. 400-411, 2005. doi: 10.1111/j.1365-3113X.2004.02304.x.

2 REY, M. W. et al. Complete genome sequence of the industrial bacterium *Bacillus licheniformis* and comparisons with closely related *Bacillus* species. **Genome Biology**, v. 5, n. 10, p. R77.1-R77.12, 2004. doi: 10.1186/gb-2004-5-10-r77.

3 CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I. High-throughput cloning, expression and purification of glycoside hydrolases using Ligation-Independent Cloning (LIC). **Protein Expression and Purification**, v. 99, p. 35-42, 2014. doi: 10.1016/j.pep.2014.03.008.

IC26

Técnicas de regularização no efeito Casimir

SANTI, N. S. M.¹; CUCCHIERI, A.¹

natali.santi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Classicamente a noção de vácuo é associada ao estado físico obtido com a exclusão de toda a matéria de uma dada região do espaço. Ao mesmo tempo, devemos também remover todas as partículas mediadoras das interações fundamentais, como os fótons no caso da interação eletromagnética. No entanto, o vácuo quântico é povoado por uma legião de partículas, denominadas virtuais, que não podem ser removidas. De fato, devido ao *princípio da incerteza de Heisenberg*, no vácuo quântico é permitido violar momentaneamente o *princípio de conservação da energia*, contanto que essa variação de energia ΔE aconteça por um intervalo de tempo Δt suficientemente curto, isto é, menor do que $\hbar/(2\Delta E)$. Logo, pares de partículas e anti-partículas surgem e se aniquilam tão rapidamente que sua detecção direta é impossível. Embora as partículas virtuais não sejam diretamente detectáveis, elas são capazes de produzir efeitos observáveis como o *Efeito Casimir*. Neste efeito há a atração entre duas placas metálicas, eletricamente neutras e com massas desprezíveis. De fato, as flutuações quânticas do vácuo geram uma diferença de pressão entre a região interna (entre as placas) e a região externa às mesmas. Mais especificamente, a causa do pequeno espaço entre as placas, a densidade de partículas é menor entre as placas do que no espaço externo. Assim, há uma maior pressão externa do que interna o que possibilita a atração entre as placas. Para o *campo eletromagnético livre* o vácuo possui energia E_0 dada pela energia de ponto zero de um número infinito de osciladores harmônicos desacoplados, isto é, E_0 é infinita. Nesse trabalho calculamos a energia U entre duas placas metálicas, neutras e paralelas no vácuo a uma distância d . A partir da energia, calculamos a força atrativa entre essas duas placas. Devido ao valor infinito de E_0 , o cálculo da energia U requer o uso de um método de regularização. Esse cálculo foi feito utilizando a *regularização por cut-off* (1) e a *regularização dimensional*. (2)

Palavras-chave: Efeito casimir. Regularização dimensional. Regularização por cut-off.

Referências:

1 GREINER, W. **Quantum mechanics** : special chapters. Berlin: Springer, 2001. 133 p.

2 MILTON, K. A. **The Casimir effect**: physical manifestation of zero-point energy. Singapura: World Scientific, 2001. 20 p.

IC27

Influence of frequency distribution on the discontinuous phase transition in networks of Kuramoto oscillators

SANTOS, E. R.¹; PERON, T. K. D. M.¹; RODRIGUES, F. A.²

edmilson.roque.santos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Synchronization is a phenomenon consisting in the onset of collective behaviour, which is present in many systems, such as neurons, fireflies, chemical processes and social dynamics. Synchronization processes correspond to the adjustment of rhythms due to a weak interaction among the individuals in the system, being suitably described by the paradigmatic Kuramoto model. The Kuramoto model considers that the dynamics of each oscillators is described by a phase, whose evolution depends on the natural frequency and on a sinusoidal coupling function depending on the phase difference between the connected oscillators. In addition, there is the order parameter, which measures the system's state, synchronous or asynchronous, reducing the number of quantities to be determined in order to describe macroscopically the behaviour of the whole system. Indeed, this model is one of the most studied currently, since it is analytically tractable and preserves the non-linearity of the dynamics. In the traditional Kuramoto model (1), which considers all-to-all coupling among the oscillators and the natural frequency of the oscillators are distributed according to a symmetric probability distribution, the order parameter undergoes a continuous synchronization phase transition as the coupling strength between the oscillators is increased. However, it has been recently observed that discontinuous phase transition can indeed occur in networks whose nodes are Kuramoto oscillators. (2) This phenomenon takes place when the natural frequency of each oscillator is positively correlated with its number of connections (the nodes' degree). In order to obtain a better understanding of how robust is the discontinuous synchronization phase transition in this system, we investigate a more general case in which only a percentage of the nodes have natural frequencies correlated with the degree, i.e., a partial correlation. In this sense, we have obtained analytically the dependence of the order parameter on the coupling strength based on mean-field approximations (3), which are in good agreement with the simulation results. Furthermore, we observe that the emergence of discontinuous phase transition is present even in the partial correlation case. In the future, our goal is to extend this analysis to other systems, for instance the second-order Kuramoto model, which has been used to describe and analyze the stability of real power grid systems.

Keywords: Synchronization. Kuramoto model. Discontinuous synchronization phase transition.

Referências:

1 STROGATZ, S. H. From Kuramoto to Crawford: exploring the onset of synchronization in populations of coupled oscillators. **Physica D**, v. 143, n. 1-4, p. 1-20, 2000.

2 GOMEZ-GARDEÑES, J.; GOMEZ, S.; ARENAS, A.; MORENO, Y. Explosive synchronization transitions in scale- free networks. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 12, p. 128701-1-128701-4, 2011.

3 COUTINHO, B. C.; GOLTSEV, A. V.; DOROGOVTSSEV, S. N.; MENDES , J. F. F. Kuramoto model with frequency- degree correlations on complex networks. **Physical Review E**, v. 87, n. 3, p. 032106-1-032106-11, 2013.

IC28

Expressão, purificação da enzima UCK1 da via de salvação de pirimidinas do parasita *Schistosoma mansoni*

SARRO, G. V.¹; ROMANELLO, L.¹; TORINI, J. R.¹; BIRD, L.²; NETTESHIP, J.²; OWENS, R.²; REDDIVARI, Y.²; BRANDÃO NETO, J.³; PEREIRA, H. M.¹

gabrielasarro@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Oxford Protein Production Facility UK, Didcot - Oxfordshire.

³Harwell Science and Innovation Campus Didcot - Oxfordshire;

O *Schistosoma mansoni* é o parasita responsável pela esquistossomose, doença que afeta cerca de 207 milhões de pessoas no mundo.(1) A via de síntese e salvação de pirimidinas tem sido citada como um alvo potencial para o desenvolvimento de fármacos contra o parasita. A uridina citidina quinase (UCK), atua na via de salvação de pirimidinas, catalisando a fosforilação de uridina e citidina para seus respectivos monofosfatos (UMP e CMP). Essa enzima também é capaz de catalisar a fosforilação de vários ribonucleosídeos.(2) O cDNA correspondente à enzima UCK1 (245 aminoácidos - 27,7 KDa) foi amplificado por PCR e clonado no vetor de expressão pOPIN (S3C) que foi inserido em *E. coli* Lemo21 (DE3) através de transformação por choque-térmico nas dependências do laboratório Oxford Protein Production Facility (OPPF) em Harwell - UK.(3) Para expressão da enzima, as bactérias cresceram à 37°C durante 4 horas até D.O. = 0.6, e então foram induzidas com 1 mM de IPTG e incubadas durante 16 horas à 20°C. Devido à presença de uma cauda poli-histidina, a enzima foi purificada por cromatografia de afinidade em coluna de cobalto. A proteína foi expressa e purificada com rendimento de 12 mg/L. Após purificada, a proteína foi submetida a ensaios de DSF (Differential Scanning Fluorimetry) onde foi feito um screening de tampões para otimizar a estabilidade da proteína. A melhor estabilidade da proteína foi obtida com o seguinte tampão: 20 mM HepesNa; 100 mM Sulfato de amônio e 5 mM tartarato de sódio em pH 7.6. O entendimento da estrutura juntamente com a atividade enzimática, contribui para o entendimento bioquímico do parasita e colabora para o desenvolvimento de futuros inibidores específicos.

Palavras-chave: *Schistosoma mansoni*. Uridina citidina quinase . Pirimidinas.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. WHO . **Report on Schistosomiasis**. Geneva: WHO,2010. p.144.
- 2 NELSON, D. L.; COX, M. M.. Biossínteses de aminoácidos, nucleotídeos e moléculas. In: NELSON, D. L.; COX, M. M.. **Lehninger: princípios de bioquímica**. São Paulo: Artmed, 2014. 639-681 p.
- 3 BERROW, N. S. et al. A versatile ligation-independent cloning method suitable for high-throughput



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

expression screening applications. **Nucleic Acids Research**, v. 35, n. 6, p. e45-1-e45-12, 2007.

IC29

Elaboração e caracterização no estado sólido de novas formas sólidas de Inibidores Seletivos de Recaptação de Serotonina

SOLER, T. de O.¹; SILVA, C. C. P. da²; CARVALHO JUNIOR, P. de S.²

talitasoler@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

Os insumos farmacêuticos ativos (APIs) podem apresentar diferentes formas sólidas, as quais podem apresentar propriedades físico químicas características. O entendimento dessas formas sólidas é de fundamental importância para o planejamento e o desenvolvimento de novos medicamentos. Sendo assim, a Engenharia de Cristais tem sido amplamente empregada como estratégia de otimização das propriedades farmacêuticas dos APIs. (1) Neste contexto, o presente projeto visou o planejamento racional, a síntese supramolecular e a caracterização de novas formas sólidas, preferencialmente sais, de fármacos Inibidores Seletivos de Recaptação de Serotonina, dentre os quais, neste caso, destacam-se a Fluoxetina, Sertralina e Paroxetina. O método utilizado para a síntese supramolecular das possíveis novas formas foi o de evaporação lenta a partir de solvente(s) e por meio da modificação coerente das condições de cristalização, elaboradas especificamente para cada API. Em cada caso os co-formadores foram escolhidos se baseando em análises estatísticas dos synthons preferenciais das interações intermoleculares envolvendo os grupos funcionais do API em questão usando para tanto a bases de dados cristalográfica Cambridge Structural Database. (2) Assim sendo, no trabalho realizado anteriormente, foram obtidos e caracterizados os sais de Nitrato de Fluoxetina (FLX+NO₃-), Tetrafluoroborato de Fluoxetina (FLX+BF₄-) e Fluoreto de Sertralina (SRT+F-). No atual projeto optou-se pela obtenção de novas formas sólidas a partir de novos reagentes tais como ácidos orgânicos, destacando entre esses o ácido oxálico, maleico, benzoico, succínico, fumárico, metílico e acético, que são compostos seguros para utilização em formulações farmacêuticas, além de apresentarem grupos funcionais complementares aos dos fármacos estudados. Para isso, experimentos de cristalização foram realizados variando-se não só as moléculas co-cristalizantes, mas também o PH, solvente (s), temperatura e pressão. Até o momento, obteve-se o Oxalato de Sertralina, analisado por difração de raio-X por monocristal. Igualmente, utilizou-se outra técnica analítica, a microscopia térmica com luz polarizada (Hot-stage), para evidenciar uma das propriedades físico-químicas dessa nova estrutura e compará-la com formas já existentes. É válido ressaltar que os protocolos de obtenção das possíveis novas estruturas foram elaborados a partir dos dados catalogados na literatura até o momento, juntamente com as previsões teóricas obtidas a partir na análise da conformação molecular de cada API. (3)

Palavras-chave: Antidepressivo. Cristalização. Polimorfismo.

Referências:

1 GIANCATERINO, R.. **Depressão infantil:** estratégias de intervenção psicopedagógicas em sala de

aula com crianças depressivas. Disponível em: <<http://meuartigo.brasilecola.com/educacao/depressao-infantil-estrategias-intervencao-psicopedagogica-.htm>>. Acesso em: 04 ago. 2015..

2 WONG, D. T.; PERRY, K. W.; BYMASTER, F. P. The discovery of Fluoxetine Hydrochloride (Prozac). **Nature Reviews Drug Discovery**, v. 4, p. 764, 2005. doi: 10.1038/nrd1821.

3 GARRIDO, E. M. et al. . Fluoxetine and Norfluoxetine revisited: new insights into the electrochemical and spectroscopic properties. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 113, n. 36, p. 9934, 2009.

IC30

Caracterização biofísica da proteína Cwc21 de *Trypanosoma brucei*

SOUZA, G. E. de¹; SILVA, I. R.¹; SILVA, M. T. A. da¹; THIEMANN, O. H.¹

guilherme.eduardo.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Tripanossomatídeos utilizam o *splicing* de RNA para a maturação de pré-mRNAs nucleares de duas formas distintas: primeiro, como em outros eucariotos, o *cis splicing* é usado para a remoção do íntron. Este parece ser um evento raro em tripanossomatídeos. Segundo, tripanossomatídeos processam todos os seus pré-mRNAs nucleares através de SL *trans splicing*, um processo pós-transcricional de capeamento do mRNA, e como tripanossomatídeos transcrevem seus genes codificantes para proteínas policistronicamente, esse processo resolve mRNAs individuais de precursores policistronicos em conjunção com poliadenilação. O SL *trans splicing* não foi encontrado em células de insetos e mamíferos; portanto, é específico aos parasitos e não presente nos hospedeiros de tripanossomatídeos. (1) Foi demonstrado, em leveduras, que a Cwc21p, proteína associada ao NTC, é ortóloga ao fator de *splicing* SRm300 em humanos, e que ambos podem se ligar diretamente aos dois principais fatores de *splicing*: Prp8p, um cofator na catálise do *splicing*, e Snu114p, a única GTPase no spliceossomo. CWC21 interage geneticamente com ISY1, um fator de fidelidade proposto como promotor da conformação do spliceossomo favorável à química do primeiro passo. É proposto que a Cwc21p funcione em um estágio similar no ciclo do *splicing*, durante ou antes do primeiro passo químico do *splicing*, possivelmente através da sua interação com Prp8p e Snu114p. A Cwc21p não é essencial ao crescimento celular. Análise da região promotora a montante de CWC21 revelou um sítio de ligação para Crz1p, um fator ativado por condições de estresse ambiental específicas como exposição a choque osmótico, feromônios, e altas temperaturas. A deleção dos genes para CWC21 e ISY1 resultaram no acúmulo preferencial de transcritos que codificam para proteínas ribossomais ou outros fatores envolvidos na translação. Isto sugere um mecanismo potencial pelo qual Cwc21p pode afetar o *splicing* de alguns ou todos os transcritos em resposta a mudanças ambientais ou metabólicas. (2) Ensaios em *Trypanosoma brucei* mostraram que, nesse organismo, Cwc21 é uma proteína essencial e parece ser necessária ao primeiro passo do *splicing*. (1) A fim de se caracterizar biofisicamente a proteína Cwc21 de *T. brucei*, a sequência codificante foi previamente clonada na cepa de expressão *E. coli* BL21 rosetta1 (DE3) pelo doutorando Ivan Rosa e Silva, expressa e purificada por afinidade em coluna de níquel. A cauda de hexa-histidina foi clivada através da protease trombina, e a proteína recombinante foi purificada através de cromatografia de exclusão molecular. Serão realizados experimentos de espectroscopia de dicroísmo circular, testes de interação com o U5-snRNA, e ensaios de pré-cristalização.

Palavras-chave: Splicing. Tripanossomatídeos. Cwc21.

Referências:

1 LUZ AMBRÓSIO, D.et al. Spliceosomal proteomics in *Trypanosoma brucei* reveal new RNA splicing

factors. **Eukaryotic Cell**, v. 8, n. 7, p. 990-1000, 2009. doi: 10.1128/EC.00075-09.

2 GRAINGER, R. J. et al. Physical and genetic interactions of yeast Cwc21p, an ortholog of human SRm300/SRRM2, suggest a role at the catalytic center of the spliceosome. **RNA**, v. 15, n. 12, p. 2161-2173, 2009. doi: 10.1261/rna.1908309.

IC31

Tipagem do elemento SCCmec de amostras de *Staphylococcus aureus* resistentes à metilicina (MRSA) isolados em São Carlos

UEMURA, E. R.¹; OKADO, J. B.¹; CAMARGO, I. L. B. C.¹

erika.uemura@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - IFSC

Staphylococcus aureus são bactérias gram-positivas que causam diversos tipos de doenças, que abrangem desde uma simples infecção de pele até doenças graves, tais como a síndrome do choque tóxico e endocardite. Ademais, é importante ressaltar que essas bactérias são as principais causadoras de infecções nosocomiais cujo tratamento tem se tornado um grande desafio, visto que ao longo do tempo passaram a apresentar resistência aos diversos antibióticos. *S. aureus* que são resistentes à metilicina e outros betalactâmicos são denominados MRSA (do inglês *Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus*) e aqueles sensíveis, de MSSA (do inglês *Methicillin-Susceptible Staphylococcus aureus*). A resistência é conferida devido à presença do gene *mecA* ou *mecC* que estão inseridos em um elemento genético móvel conhecido como SCCmec (do inglês *Staphylococcal Cassette Chromosome mec*). *S. aureus* também contém genes que evoluem lentamente, sendo denominados *housekeeping*. Estes são bons indicadores para estimar a filogenia de linhagens. Para este projeto, quarenta e nove amostras de *S. aureus* foram isoladas do hospital Santa Casa de Misericórdia de São Carlos - SP para serem analisadas. Foi realizada a extração do DNA desses microrganismos por lise mecânica, como descrito por Palazzo et al (2007). (1) Para a tipagem do elemento SCCmec foi utilizado o método *Multiplex* PCR como descrito por Kondo et al (2006) (2), separada em duas reações de MPCR, uma para determinação do complexo *mec* e outra para determinação do complexo *ccr*. Dando sequência, para análise dos genes *housekeeping*, os ST's (do inglês *Sequence Typing*) de onze amostras foram determinados pelo método MLST, de acordo com Enright et al (2000) (3), sendo que foram analisados no banco de dados do site www.mlst.net. Os resultados foram obtidos com sucesso, pois as tipagens de todas as amostras foram determinadas. Sendo assim, foi possível verificar que 81,63% das amostras totais foram classificadas como SCCmecII, 14,29% eram sensíveis à metilicina e apenas 4,08% foram determinadas como SCCmecIV. Pelo MLST, verificou-se a presença das linhagens ST105-SCCmecII (54,55%), ST5-SCCmecII (27,27%) e ST8-SCCmecIV (18,18%). Além disso, não houve a presença de isolado da linhagem BEC no hospital Santa Casa de Misericórdia de São Carlos, em que era prevalente nos hospitais brasileiros, indicando a substituição desse clone por linhagens disseminadas internacionalmente.

Palavras-chave: MRSA. Elemento SCCmec. Gene *housekeeping*.

Referências:

1 PALAZZO, I. C. V.; REHDER, A.; DARINI, A. L. C. Quantitative disk diffusion as a convenient method for determining minimum inhibitory concentrations of oxacillin for *Staphylococci* strains. **Journal of**

Microbiological Methods, v. 71, n. 3, p. 186-190, 2007.

2 KONDO, Y. et al. Combination of multiplex PCRs for Staphylococcal cassette chromosome *mec* type assignment: rapid identification system for *mec*, *ccr*, and major differences in junkyard regions.

Antimicrobial Agents and Chemotherapy, v. 51, n. 1, p. 264-274, 2007.

3 ENRIGHT, M. C. et al. Multilocus sequence typing for characterization of methicillin-resistant and methicillin-susceptible clones of *Staphylococcus aureus*. **Journal of Clinical Microbiology**, v. 38, n. 3, p. 1008-1015, 2000.

IC32

Análise da distribuição de íons ao redor de proteínas globulares em solução eletrolítica usando técnicas de Dinâmica Molecular

VISCARDI, L. A. M.¹; CÂMARA, A. S.¹; HORJALES, E.¹

leandro.ff12@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A teoria de Debye-Hückel (1) prevê a formação de uma camada de blindagem ao redor de um corpo esférico carregado superficialmente, quando envolto por uma solução eletrolítica. (2) Por possuírem energia cinética, os íons presentes na solução se afastam do corpo carregado, mas ao mesmo tempo são atraídos por sua força eletrostática. Esse movimento faz com que eles permaneçam em uma camada ao redor do corpo, como uma nuvem carregada de espessura finita, λ_D , denominada distância de blindagem de Debye, ou, raio de Debye. Além disso, a esfera carregada é completamente blindada por uma nuvem de carga oposta na solução eletrolítica. Contudo, ao invés de usarmos um corpo esférico carregado, podemos usar uma proteína globular com resíduos carregados, para assim, avaliar a teoria de Debye-Hückel, inclusive já foi verificado que muitos processos bioquímicos dependem da blindagem de Debye. (3) Neste projeto, pretende-se analisar computacionalmente se a blindagem de Debye ocorre ao redor de uma proteína globular com resíduos carregados. Assim, foram realizadas diversas simulações de dinâmica molecular para uma proteína em equilíbrio com seu solvente, variando-se as concentrações dos íons e usando a proteína neutra ou protonada. Assim, analisamos como se comporta a distribuição de íons numa solução eletrolítica ao redor da proteína presente, para então comparar com o resultado teórico, descrito pela teoria de Debye-Hückel.

Palavras-chave: Íon. Proteína. Densidade eletrônica.

Referências:

- 1 DEBYE, P; HÜCKEL, E. Zur Theorie der Elektrolyte. I: gefrierpunktserniedrigung und verwandte erscheinungen = The theory of electrolytes I: lowering of freezing point and related phenomena. **Physikalische Zeitschrift**, v. 24, n. 9, p. 185-206, 1923.
- 2 BENEDEK, G. B.; VILLARS, F. M. H. **Physics with illustrative examples from medicine and biology**: electricity and magnetism. New York: Springer Verlag, 2000. v.3. 395-408 p.
- 3 LINDERSTROM-LANG, K. On the ionization of proteins. **Comptes-rendus des Travaux du Laboratoire Carlsberg**, v. 15, n. 7, p. 1-29, 1924.

IC33

Análise dos efeitos da fototerapia em modelo de membrana corioalantóica de ovos de galinha

ZANGIROLAMI, A. C.¹; BUZZA, H. de H.¹; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

amanda.zangirolami@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A fototerapia consiste em uma forma de terapia onde a luz é a protagonista na ação da bioestimulação.(1) O tecido é bioestimulado quando, já em atividade, recebe uma ação externa como a luz, e intensifica estas atividades. Essa terapia é um tratamento muito recorrente nos dias atuais na área de saúde, como consultórios odontológicos, dermatológicos, clínicas veterinárias e centros de reabilitação e fisioterapia.(1) Ela é muito usada para tratamento de dores nas áreas de reumatologia e doenças de pele, como dermatites e edemas, processo de cicatrização, regeneração celular e aceleração de processos anti- inflamatórios ocasionando a vasodilatação. A técnica de irradiação tem sido estudada por mais de 30 anos(2), entretanto, não é completamente entendido seu mecanismo de ação e todos os seus efeitos, assim como a influência da radiação em embriões.(2) O modelo de membrana corioalantóica (CAM) em ovos de galinha é muito frequente para estudos de angiogênese devido ao fácil acesso à rede vascular do embrião em desenvolvimento, além de ser um modelo de simples manuseio e armazenamento. É considerada uma alternativa ao uso de animais, de acordo com o desenvolvimento embrionário do ovo de galinha, a formação do sistema nervoso inicia-se no décimo quarto dia e, portanto, se trabalhado com a CAM antes deste período não há sofrimento para o embrião. Os parâmetros da luz irradiada são essenciais para o tipo de resultado que se procura. Através de uma revisão bibliográfica foi observado que doses acima 1 J/cm² e irradiância acima 12 mW/cm² não trazia efeitos benéficos, tais como crescimento e desenvolvimento celular. O trabalho combinou o modelo de CAM e a fototerapia, utilizando duas fontes diferentes de luz: Laser(635 nm) e LED(635 nm). A escolha da luz nessa faixa vermelha se deve ao fato dela penetrar mais pelo tecido biológico, pois as moléculas biológicas absorvem menos nesta faixa. Os parâmetros testados variaram de 70 a 0,014 mW/cm², com intervalo de 10 a 0,5 J/cm². A iluminação da CAM aconteceu através de uma janela aberta de cerca de 2 cm² na casca do ovo. O esperado era verificar um aumento da rede vascular para quantificá-lo, entretanto houve uma alteração muito pequena na rede vascular, por isso a análise passou a ser feita no embrião. Os resultados eram tidos a partir de fotos capturadas da janela dos embriões e da CAM antes e depois da iluminação. Os grupos analisados foram divididos pela dose de luz recebida e frequência de iluminação, variado em apenas uma dose de luz recebida em apenas 1 dia, 3 em 3 dias, dia sim dia não, todos os dias. Foi possível verificar que os iluminados todos os dias não se desenvolviam tão bem quanto o controle, não iluminado. O grupo que mais se desenvolveu foi grupo iluminado a cada três dias, mostrando que a quantidade de luz recebida pode influenciar diretamente o desenvolvimento do embrião.

Palavras-chave: Fototerapia. Membrana corioalantóica. Embrião.

Referências:

1 VLADIMIROV, Y. A.; OSIPOV, A. N.; KLEBANOV, G. I.. Photobiological principles of therapeutic applications of laser radiation. **Biochemistry (Moscow)**, v. 69, n. 1, p. 81-90, 2004.

2 ROMANIUK, M. S. et al.. Influence low-Intensity laser irradiation on ultrastructural organization of loach embryo cells. **Cytology and Genetics**, v. 48, n. 3, p. 171-174, 2014.

PG1

Complex network dynamics for authorship recognition

AKIMUSHKIN, C.¹; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹

camilo.akimushkin@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A great amount of complexity embedded in written texts is reflected on the ordering of word chains which has been shown to characterize languages, literary movements and authors. Main goal in authorship identification is to separate texts into groups each one containing texts from same author allowing dubious authorship resolution. (1-2) While word co-occurrence has proven useful for text characterization (3), less attention has been given to its dynamical evolution on a given literary work. Heterogeneity and scarcity of available texts is a common issue in this scenario. A study on the dynamical features of written texts may unveil both useful measures for text characterization and hints for further understanding of network evolution mechanisms. A collection of 300 texts from 27 authors was used. For each text a time series of networks is constructed, subsequently classification and clustering methods are applied to a set of proposed measures. Most time series obtained follow a non-gaussian bell shape. Series analysis performed especially well with density-based and hierarchical single-linkage clustering where almost all the texts were correctly grouped. Results show a meaningful role of our dynamical measures making non-overlapping groups where measures change steadily from one text to another for the same author.

Keywords: Complex networks. Authorship recognition. Text mining.

Referências:

1 ARGAMON, S.; JUOLA, P. **Overview of the international authorship identification competition at PAN-2011**. Disponível em: <<http://www.uni-weimar.de/medien/webis/events/pan-11/pan11-papers-final/pan11-author-identification/juola11-overview.pdf>>. Acesso em: 10 set. 2015.

2 CHOUDHURY, M.; MUKHERJEE, A.. The structure and dynamics of linguistic networks. In: GANGULY, N.; DEUTSCH, A.; MUKHERJEE, A. (Eds.). **Dynamics on and of complex networks: applications to biology, computer science, and the social sciences**. Boston: Springer, 2009. 145–166 p.

3 AMANCIO, D. R. et al.. Comparing intermittency and network measurements of words and their dependence on authorship. **New Journal of Physics**, v. 13, n. 12, p. 123024, 2011. doi: 10.1088/1367-2630/13/12/123024.

PG2

Images from stomata networks and geometric measures shows physiologic intelligence during environmental adaptation in 4 monocot species from commelinids subclade: a new evolutionary paradigm.

ALMEIDA FILHO, H. A.¹; MARTINEZ, O. B.¹

beto@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Stomata are small hole like cells that performs gas exchange at leaf surface regulating the loss of water and CO₂ uptake relation during photosynthesis at plant. (1) Thereby it is a kind of valve controlling ratios between water and biomass accumulation by plants. Many studies have related the high plasticity of leaf tissue and stomata patterning to environmental changes, showing as the photosynthetic capacity are correlated with it. (2) The stomata patterning, frequency, area, and neighboring distances possess great variation between plant species and environmental conditions.(3) However the puzzle that correlates environmental changes to stomata network geometries and patterning are not completely elucidated. Furthermore the scales of geometric variation at stomata networks between the species and the conserved patterns behind it can reveal how the evolutionary diversity of this phenotype correlates with environmental conditions. We show here optical microscopy images of stomata networks from species *Tradescantia pallida*, *Tradescantia zebrina*, *Callisia repens* and *Calathea sp*, all monocotyledonous belonging to commelinids subclade, they reveals that along the species the average stomata area decreases according the their frequency at leaf, and the same is observed at only one specie if environmental conditions as humidity varies in order to trigger a change in stomata frequency. The scale of range is threshold adapted to each specie and is accompanied by varying stomata area. Amazingly the fluorescent light exposure of *T. pallida* to extreme environmental condition of 24-hour daily, caused a complete disorganization of the stomata spatial pattern and polarization followed by increases at stomata leaf frequency. Furthermore the images made it possible to model the stomata lattice as a complex network according with neighborhood criteria between stomata distances. The Network average distances measurements between the 20 nearest neighbor stomata allowed grouping *Callisia repens* plants adapted to high humidity and theirs specimens exposed to diverse environmental conditions at different image clusters. It shows that this kind of measurement can be used to predict whether plants are exposed to different environmental conditions.Taken together these data show that phenotypes such as stomata frequency and pattern has a wide range to environmental adaptation, but there are rules under which the adaptation performs. It shows the intelligence of biological systems with respect to their suitability for changes at environmental adaptation. Moreover these rules are maintained throughout the range of phenotypes across species, ie. if there are species with fewer stomata size than others, the stomata frequency will be higher to compensate the decrease in size. This can be a paradigm under which the evolution of the phenotype is processed.

Keywords: Stomata. Networks. Evolution.

Referências:

- 1 COWAN, I. R.; FARQUHAR G. D. Stomatal function in relation to leaf metabolism and environment. **Symposia of the Society for Experimental Biology**, v. 31, p. 475-505, 1997.
- 2 ARAUS, J. L.; ALEGRE, L.; TAPIA, L.; CALAFELL, R.; SERRET, M. D.. Relationships between photosynthetic capacity and leaf structure in several shade plants.. **American Journal of Botany**, v. 73, n. 12, p. 1760-1770, 1986.
- 3 CROXDALE, J.L.. Stomatal patterning in angiosperms.. **American Journal of Botany**, v. 87, n. 8, p. 1069-1080, 2000.

PG3

Waveguide fabrication in L-threonine crystals using ultrashort laser pulses

ALMEIDA, G. F. B. de¹; RODRIGUES JUNIOR, J. J²; MENDONÇA, C. R.¹

gustavo.forestalmeida@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Física - UFS

Over the years, direct laser writing using femtosecond laser has shown to be one of the most important techniques for material processing due to its versatility to modify material's properties. One feature that receives great attention is the ability of changing the index of refraction of materials to produce three-dimensionally confined structures. The most common volumetric modification is the production of waveguides, that are of high demand for integrated optics. In this context, organic materials present interesting properties for photonics applications. For instance, L-threonine crystals have low index of refractive index, wide window of transparency (250 nm - 1500 nm), good second harmonic generation efficiency and low third order susceptibility. (1) Such characteristics are desirable for nonlinear optical devices. In this work, we used a Ti:sapphire laser that produces 50 fs pulses at 800 nm (5.2 MHz operation rate) to fabricate waveguides. Pulse energy of 20 nJ and scan speed of 20 $\mu\text{m/s}$ were found optimal parameters for waveguide fabrication. Homogeneous, 8mm long waveguides with diameter on the order of approximately 1.0 μm have been obtained. Waveguide coupling was performed using a He-Ne laser, with the aid of microscope objectives and a camera; a total loss of 24.8 dB/mm was measured. In conclusion, we showed the feasibility of fs-laser waveguide production in L-threonine crystals by demonstrating its fabrication and characterization.

Keywords: Femtosecond laser. Microfabrication. Waveguides.

Referências:

1 RODRIGUES JUNIOR, J. et al. Optical properties of L-threonine crystals. **Optical Materials**, v. 22, p. 235, 2003. doi: 10.1016/S0925-3467(02)00270-7.

PG4

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

AMARANTE, A. M.¹; OLIVEIRA, G. S.²; IERICH, J. C. M.³; MORAES, A. S.³; FREITAS, L. C. G.⁴; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹; LEITE, F. L.²

amarante_adriano2@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar - Campus Sorocaba

³Instituto de Medicina Tropical de São Paulo - USP

⁴Universidade Federal de São Carlos - UFSCar - Campus São Carlos

Neste projeto serão utilizadas técnicas computacionais para correlacionar curvas de força obtidas com a técnica de microscopia de força atômica (AFM, do inglês atomic force microscopy) com simulações de dinâmica molecular. O objetivo principal deste trabalho é o estudo e aperfeiçoamento de técnicas de desenvolvimento de nanobiossensores por intermédio da funcionalização das pontas de AFM para a detecção de contaminantes e agentes autoantígenos relacionados a doenças desmielinizantes, em especial, a Neuromielite Óptica (NMO). A NMO é uma doença inflamatória autoimune na qual o próprio sistema imunitário ataca os nervos ópticos e a medula espinhal. Dados da literatura apontam para um papel central de anticorpos anti-aquaporina 4 no diagnóstico de tal patologia. (1) Com o presente estudo busca-se auxiliar no design de imunossensor com pontas de AFM, determinando-se as forças de interação entre os peptídeos da aquaporina 4 (AQP4) e anticorpos anti-aquaporina 4 (anti-AQP4). Fatores como arranjo e distribuição das biomoléculas em nanossuperfícies, bem como orientação dos sítios ativos, podem afetar as interações alvo e, conseqüentemente a força de adesão nos experimentos de AFM. (2) As nanossuperfícies funcionalizadas com biomoléculas serão caracterizadas com relação às suas dimensões e simuladas computacionalmente utilizando dinâmica molecular (DM). O recobrimento destas nanossuperfícies será obtido por meio de cálculos estocásticos, aplicados aos resultados obtidos por DM. Estes cálculos poderão fornecer a distribuição do arranjo das biomoléculas nas nanossuperfícies (substratos e pontas de AFM não funcionalizadas e funcionalizadas), em termos de suas configurações aleatórias. Após a modelagem do recobrimento molecular, as interações intermoleculares serão determinadas por dinâmica molecular direcionada (SMD, do inglês, Steered Molecular Dynamics). (3) Tais modelos serão efetivamente corroborados com resultados experimentais de AFM.

Palavras-chave: Microscopia de força atômica. Neuromielite óptica. Dinâmica molecular.

Referências:

1 WATERS, P.J. et al. Serologic diagnosis of NMO: a multicenter comparison of aquaporin-4-IgG assays.

Neurology, v. 78, n. 9, p. 665-671, 2012. doi: 10.1212/WNL.0b013e318248dec1.

2 AMARANTE, A. M.; OLIVEIRA, G. S.; BUENO, C. C.; CUNHA, R. A.; IERICH, J. C. M.; FREITAS, L. C. G.; FRANCA, E. F.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; LEITE, F. L. Modeling the coverage of an AFM tip by enzymes and its application in nanobiosensors. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 53, p. 100-104, 2014. doi: 10.1016/j.jmgm.2014.07.009.

3 ISRALEWITZ, B. et al. Steered molecular dynamics investigations of protein function. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 19, n. 1, p. 13-25, 2001. doi: 10.1016/S1093-3263(00)00133-9.

PG5

Acompanhamento da resposta vascular e do recrescimento de tumor de pele após associação de terapia fotodinâmica e radioterapia

ANDRADE, C. T.¹; KANICK, S. C.²; MARRA, K.²; GUNN, J.³; ANDREOZZI, J.³; SAMKOE, K. S.²; BAGNATO, V. S.¹; POGUE, B.³; KURACHI, C.¹

cintya_teles@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Department of Surgery - Geisel School of Medicine - Dartmouth College

³Thayer School of Engineering - Dartmouth College

A terapia fotodinâmica (TFD) e a radioterapia são opções de tratamento de câncer com diferentes mecanismos de danos. A TFD consiste na combinação de um fotossensibilizador, luz e oxigênio molecular para causar dano à célula. Já a radioterapia utiliza radiação ionizante para provocar a morte do tumor. A combinação destas técnicas mostrou um potencial efeito sinérgico, e pode atenuar as suas limitações, tais como a baixa penetração da luz visível para a TFD e os efeitos colaterais provenientes da radioterapia (1-3). O objetivo desse estudo é monitorar as alterações do tecido induzidas após TFD, radioterapia, e um protocolo de combinação de ambas, utilizando um sistema de espectroscopia óptica para acompanhar as mudanças observadas em parâmetros fisiológicos. Primeiramente, os experimentos foram realizados em pele normal de ratos Wistar e depois repetidos em tumores de pele em camundongos Nude, onde também foram realizadas medidas de recrescimento do tumor após os tratamentos. Os animais foram tratados com um dos seguintes protocolos: TFD seguida de radioterapia, TFD apenas, radioterapia apenas e radioterapia seguido pela TFD. Espectros de fluorescência e de refletância, além de imagens de luz branca, foram coletados a fim de observar os efeitos dessas terapias combinadas, com atenção especial dirigida à resposta vascular. A partir da refletância, informações sobre a saturação de oxigênio, concentrações de meta-hemoglobina e bilirrubina, fração de volume sanguíneo e raio do vaso foram extraídos do modelo de ajustamento (fitting) dos espectros. Para as análises ópticas, os animais foram monitorados durante 6 dias após o tratamento. Nos ratos Wistar, os resultados mostraram que não houve variação significativa na fração de volume sanguíneo. No entanto, a TFD causou um aumento significativo na concentração de bilirrubina e meta-hemoglobina, indicando um importante dano ao tecido conjuntivo sanguíneo, além de variação no raio do vaso e na saturação de oxigênio. Para a combinação das técnicas, esses danos causados pela TFD reforçam a ideia da radioterapia sendo entregue em um tecido previamente danificado, o que reduz sua chance de recuperação e aumenta o dano. Com relação aos tumores de pele, que possuem menor resistência à radiação ionizante, fazendo com que a dose de radioterapia entregue tenha sido mais relevante, os resultados mostraram que há uma tendência a um aumento do dano quando se aplica a TFD previamente à radioterapia. Estes resultados podem fornecer uma pista importante sobre como o estabelecimento do dano ocorre e ajudar a compreender o efeito da combinação destas técnicas, a fim de verificar a existência de um efeito sinérgico.

Palavras-chave: Radioterapia. Terapia fotodinâmica. Resposta vascular.

Referências:

- 1 NAKANO, A.; WATANABE, D.; AKITA, Y.; KAWAMURA, T.; TAMADA, Y.; MATSUMOTO, Y. Treatment efficiency of combining photodynamic therapy and ionizing radiation for Bowen's disease. **Journal of the European Academy of Dermatology and Venereology**, v. 25, n. 4, p. 475-478, 2011.
- 2 SAZGARNIA, A.; MONTAZERABADI, A. R.; BAHREYNI-TOOSI, M. H.; AHMADI, A.; ALEDAVOOD, A. In vitro survival of MCF-7 breast cancer cells following combined treatment with ionizing radiation and mitoxantrone-mediated photodynamic therapy. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 10, n. 1, p. 72-78, 2013.
- 3 ANDRADE, C. T.; VOLLET-FILHO, J. D.; PIRES, L.; PAVONI, J. F.; BAFFA, O.; OLIVEIRA, H. M.; TIRAPELLI, L. F.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C. Synergic effect in combining photodynamic therapy and radiotherapy in Wistar rats skin model. In: INTERNATIONAL PHOTODYNAMIC ASSOCIATION WORLD CONGRESS, 15., 2015, Rio de Janeiro. **Abstracts...** Tokyo: International Photodynamic Association - IPA, 2015., p. 35, abstr. IPA035.

PG6

Desenvolvimento de redes proteicas bidimensionais automontáveis

ANDRADE, G.I B. de¹; NAVARRO, M. V. de A. S.¹

Desenvolvimento de redes proteicas bidimensionais automontáveis

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O alvo da nanotecnologia é a construção de materiais e sistemas funcionais que operem na escala de nanômetros. O uso de técnicas convencionais, principalmente a litografia, compreende a abordagem top-down para geração de estruturas bidimensionais. A abordagem bottom-up, em que seria possível manipular átomos e moléculas, foi proposta por Richard Feynman em 1959, e seria mais versátil, possivelmente permitindo a construção de sistemas tridimensionais com diversidade de formas, tamanhos e funcionalidades. No contexto desta abordagem, proteínas e peptídeos são bons candidatos a blocos de construção para formar materiais de maior ordem através de automontagem. (1) Nesse sentido, diferentes abordagens vêm sendo empregadas para o desenho racional de redes protéicas bi- e tri-dimensionais automontáveis. Brodin e colaboradores utilizaram sítios de coordenação a Zinco precisamente orientados de uma proteína dimérica para formar polímeros de uma e duas dimensões. (2) A partir dessas estruturas, foi possível avançar para a terceira dimensão através da modificação química de um resíduo na superfície da proteína que possibilitou o empilhamento das matrizes bidimensionais. Utilizando uma abordagem diferente, outros grupos relataram a obtenção de matrizes bidimensionais e jaulas através da fusão genética entre subunidades de diferentes proteínas oligoméricas. Apesar dos excelentes resultados obtidos nesses trabalhos, as estratégias utilizadas dependem amplamente das características intrínsecas dos componentes das redes, tornando-as pouco versáteis para aplicações downstream. Nesse projeto, pretendemos ampliar a versatilidade e aplicabilidade de redes proteicas automontáveis utilizando elementos com simetria interna conhecida (proteínas oligoméricas de simetria C2, C3, C4 e C6) fusionados a proteínas que possuem uma alta afinidade com um parceiro de interação específico. Para os pares de interação, que constituirão os conectores da rede, selecionamos os componentes estruturais do celulosomo, dockerinas e cohesinas. Essas proteínas ocorrem principalmente em bactérias anaeróbias, em estruturas extracelulares que formam um complexo multi-enzimático que efetua a degradação das paredes celulares vegetais. Nesse complexo, enzimas celulolíticas que possuem domínios de dockerina se ligam à estrutura central, denominada scaffoldin, através das cohesinas que esta contém. (3) A ligação entre essas proteínas é provida de alta afinidade, bem como especificidade. No desenho de nossas redes, uma delas será fusionada a um elemento com simetria C3, C4 ou C6, correspondente aos vértices das redes bidimensionais, enquanto que sua parceira será fusionada a uma proteína de simetria C2, formando o elemento linear para conexão dos vértices. As várias cadeias polipeptídicas dessas redes já foram selecionadas e os respectivos genes sintetizados. Adicionalmente, pelo menos três linkers, com diferentes tamanhos, de fusão entre as dockerinas/cohesinas e os elementos simétricos serão testados. Uma grande vantagem dessa estratégia é que os componentes poderão ser expressos e purificados independentemente, o que não é possível na abordagem anterior, possibilitando o teste de várias condições para otimizar a automontagem da rede. Em resumo, buscamos nesse projeto a obtenção de matrizes automontáveis com possibilidade de livre crescimento lateral. Há um enorme potencial para aplicações na nanotecnologia, incluindo biossensores,

biorreatores, detectores e peneiras moleculares.

Palavras-chave: Nanotecnologia. Dockerina. Cohesina.

Referências:

1 RAJAGOPAL, K.; SCHNEIDER, J. P. Self-assembling peptides and proteins for nanotechnological applications . **Current Opinion in Structural Biology**, v. 14, n. 4, p. 480 - 486, 2004. doi: 10.1016/j.sbi.2004.06.006.

2 BRODIN, J. et al. Metal-directed, chemically tunable assembly of one-, two- and three-dimensional crystalline protein arrays. **Nature Chemistry**, v. 4, p. 375 - 382, 2012. doi: 10.1038/nchem.1290.

3 SMITH, S.; BAYER, E. A. Insights into cellulosome assembly and dynamics: from dissection to reconstruction of the supramolecular enzyme complex. **Current Opinion in Structural Biology**, v. 23, n. 5, p. 686 - 694, 2013. doi: 10.1016/j.sbi.2013.09.002..

PG7

Estudos estruturais por espalhamento a baixo ângulo (SAXS) e cristalografia de raios-X de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios

ARAUJO, E. A. de¹; GOUVEA, I. E.²; POLIKARPOV, I.¹

evandroares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro de Tecnologia Canavieira - Piracicaba

O foco deste projeto é entender os efeitos da modularidade das hidrolases de glicosídeos -GHs- na desconstrução da parede celular vegetal via transformação de polímeros complexos à açúcares fermentáveis. *Para isso vamos relacionar e correlacionar as propriedades estruturais e funcionais de GHs mono/multi domínio catalíticos aliando técnicas físicas experimentais e computacionais tais como cristalografia de proteínas, espalhamento de raios-X a baixo ângulo (SAXS), dinâmica molecular e microscopia eletrônica.* Nossos estudos serão focados na classe de GHs que apresentam mais de um domínio catalítico na mesma cadeia polipeptídica (1) onde faremos uma análise comparativa entre GHs mono e multi domínios catalíticos afim de traçar estratégias para a construção de enzimas artificiais com diferentes funções e com maior potencial catalítico. Até o momento, os principais resultados obtidos no período são clonagens, expressão e purificação de uma GH da família 5 (XccGH5), uma GH da família 9 (BIGH9) e uma GH da família 48 (BIGH48); estudos biofísicos/bioquímicos tais como atividade relativa, estabilidades térmica, pH, estudos de SAXS e, no caso de BIGH9, o modelo estrutural a alta resolução foi determinado por cristalografia de raios-X. Estas enzimas foram clonadas no sistema de clonagem independente de ligase - LIC - e expressas em *E. coli* Rosetta(DE3)pLysS (Novagen). A atividade relativa de BIGH9 em função de pH e da temperatura sobre PASC/CMC como melhor substrato tem maior ação hidrolítica no pH 7 e temperatura de 50 °C, para XccGH5 foram pH 7,0 e 40 °C com maior atividade sobre beta-glucano/xiloglucano e, por fim, para BIGH48 foram pH 5,0 e 50 °C e melhor atividade para Avicel/PASC. Pelas análises estruturais por SAXS, verificou-se que as moléculas em solução de XccGH5 e BIGH48 apresentam alto grau de globularidade, com diâmetro máximo de 56,00 AA e 57,00 AA, respectivamente, enquanto BIGH9, uma molécula alongada, tem diâmetro máximo de 101,00 AA. Em todos os casos, os experimentos de SAXS foram conduzidos para acessar os estados conformacionais em solução e os resultados mostraram que essas enzimas formam monômero em solução, bem como os modelos *ab initio* demonstram que os envelopes moleculares aqui modelados são representativos para os principais estados de conformações encontrados em solução, o que pode ser avaliado pela qualidade dos ajustes entre curva simulada e experimental. (2) Chama atenção aqui o ajuste para BIGH9 com o modelo cristalográfico, indicando que essa enzima mantém em solução um empacotamento muito similar ao cristalográfico. Os modelos estruturais determinados para BIGH9 (BIGH9 apo, BIGH9 celobiose e BIGH9 celotriose) compreendem o domínio catalítico e um módulo acessório predito como CBM3. O domínio catalítico da família 9 exibe o enovelamento do tipo (alfa/alfa)₆ barril e o domínio de ligação da família composto por fitas-beta antiparalela.(3) O módulo acessório (CBM3) forma, junto ao domínio catalítico, uma superfície plana e estendida aonde pode haver a orientação e ligação das fibras de celulose

durante a ação de hidrólise.

Palavras-chave: Raios-X. Enzimas multi modulares. Bioenergia.

Referências:

- 1 BRUNECKY, R. et al. Revealing nature's cellulase diversity: the digestion mechanism of *Caldicellulosiruptor bescii* CelA. **Science**, v. 342, n. 6165, p. 1513-1516, 2013. doi: 10.1126/science.1244273.
- 2 SKOU, S.; GILLILAN, R. E.; ANDO, N. Synchrotron-based small-angle X-ray scattering of proteins in solution.. **Nature Protocols**, v. 9, n. 7, p. 1727-1739, 2014. doi: 10.1038/nprot.2014.116.
- 3 SAKON, J. et al.. Structure and mechanism of endo/exocellulase E4 from *Thermomonospora fusca*. **Nature Structural Biology**, v. 4, n. 7, p. 810-818, 1997. doi: 10.1038/nsb1097-810.

PG8

Análise de modelos de reciprocidade indireta em teoria dos jogos evolucionária

MAIA, L. P.¹; ARAUJO, G. D.¹

guilherme.david.araujo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As regras que controlam a ação dos replicadores na evolução dos seres vivos ditam a eles um comportamento egoísta. Com isso, a emergência de cooperação e comportamentos altruístas é um importante problema a ser investigado. A cooperação existe em diversas formas, e a reciprocidade é o mecanismo básico encontrado para se cooperar com um indivíduo desconhecido, com o qual não há algum vínculo, como de grupo ou de parentesco. A reciprocidade se baseia na ideia de se ajudar alguém na expectativa de que este alguém o ajude de volta. Em sociedades humanas em particular, com a complexidade de interações muitas vezes não permitindo a ocorrência de repetidos encontros com o mesmo indivíduo, tem-se o mecanismo de reciprocidade indireta, onde você ajuda um indivíduo na expectativa de que isto aumente suas chances de ser ajudado por um outro indivíduo. A cooperação por reciprocidade indireta é um mecanismo eficiente que exige e participa na construção de capacidades como a linguagem, o ambiente cultural e a complexidade cognitiva, permitindo a elaboração de sistemas de reputação e normas sociais. Desde a proposta da teoria dos jogos evolucionária por J. M. Smith e G. R. Price, em um artigo de 1973 (1), o problema da cooperação vem amplamente sendo tratado por modelos nela baseados. Neste cenário, os indivíduos são tratados como jogadores que buscam estratégias para tornar máximo seu payoff, que é medido em termos de seu sucesso reprodutivo, baseando suas estratégias em movimentos dependentes das diferentes frequências de estratégias compondo a população. Assim, o comportamento cooperativo pode ser tratado como consequência de uma intenção egoísta. Cada geração tem indivíduos que interagem em rodadas enquanto acumulam payoff para em seguida transmitir suas estratégias às próximas gerações segundo a determinação de uma equação de replicadores. Em 1998, M. Nowak e K. Sigmund (2) propuseram um modelo que trata o problema da evolução de populações de indivíduos discriminadores, com a teoria dos jogos evolucionária, estudando o conceito da reciprocidade indireta. No modelo, cada indivíduo possui uma reputação de dois níveis: bom ou ruim. A interação é baseada em um jogo do tipo dilema do prisioneiro entre dois indivíduos escolhidos ao acaso na população. Os rounds são compostos por uma série de jogos que tem seu tamanho determinado probabilisticamente e as gerações são compostas por N rounds. Cooperar significa perder um payoff c para que o outro ganhe b , com $b > c$. Os discriminadores são os indivíduos que cooperam com quem é bom e não cooperam com quem é ruim. No modelo, é testada a dinâmica de uma população composta por discriminadores, cooperadores que não discriminam e também não-cooperadores que não discriminam reputação. A partir deste modelo e de críticas subsequentes, estamos analisando suas variações para diferentes formas de se classificar e endereçar reputações (normas sociais), além de considerar os efeitos do desconhecimento de reputações e erros de julgamento. Além deste modelo, também analisaremos um modelo semelhante proposto por M. Nowak e W. Ghang em 2015 (3), baseado em interações opcionais.

Palavras-chave: Teoria dos jogos evolucionária. Cooperação. Reciprocidade indireta.

Referências:

- 1 SMITH, J. M.; PRICE, G. R. The logic of animal conflict. **Nature**, v. 246, p. 15, 1973. doi: 10.1038/246015a0.
- 2 NOWAK, M. A.; SIGMUND, K. The dynamics of indirect reciprocity. **Journal of Theoretical Biology**, v. 194, n. 4, p. 561-574, 1998. doi: 10.1006/jtbi.1998.0775.
- 3 GHANG, W.; NOWAK, M. A. Indirect reciprocity with optional interactions. **Journal of Theoretical Biology**, v. 365, p. 1-11, 2015. doi: 10.1016/j.jtbi.2014.09.036.

PG9

Localização de estados quânticos em armadilhas iônicas

ARAUJO, H.S.¹; MOUSSA, M.H.Y.¹

hugo.sanchezdearaujo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Durante a década de 90 diversos trabalhos surgiram com o objetivo de investigar a localização de estados quânticos. No contexto da eletrodinâmica quântica de cavidades é possível localizar estados não clássicos de um dado campo externo aplicado ao sistema, uma cavidade preenchida com um material não linear inicialmente preparada no estado de vácuo. (1) Baseado em tal cenário, propomos uma técnica de localização de estados vibracionais de um íon armadilhado. Para isso, considera-se um íon armadilhado em um potencial confinante cujos graus de liberdade vibracionais e os níveis eletrônicos do íon são acoplados por meio de um laser. Uma vez gerada a interação, faz-se uso da técnica de engenharia de reservatórios a fim de obtermos uma equação mestra na qual haja uma dinâmica emissiva e absorptiva, ambas artificiais, promovidas por liouvillianos engenheirados, obtidos utilizando o sistema auxiliar (níveis internos do íon). (2) Decorre-se disso uma dinâmica efetiva, já que a emissão espontânea é sempre presente. Sob um certo regime de parâmetros, a competição entre os liouvillianos leva o sistema de interesse para um estado vibracional estacionário caracterizando a localização. (3) A técnica apresentada é mais geral pois mesmo partindo-se de um estado de máxima mistura, a localização é atingida com alta fidelidade em relação ao estado vibracional almejado. O papel exercido pela engenharia de interações para o sucesso da localização é o principal fator motivador deste trabalho. Outras questões que porventura surgirem também serão alvo de estudo.

Palavras-chave: Localização de estados quânticos. Íons armadilhados. Engenharia de reservatórios.

Referências:

- 1 KUKLINSKI, J. R. Generation of Fock states of the electromagnetic field in a high - Q cavity through the Anderson localization. **Physical Review Letters**, v. 64, n. 21, p. 2507-2510, 1990.
- 2 POYATOS, J. F.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P.. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 23, p. 4728-4731, 1996.
- 3 ROSSETTI, R. F. et al. Slicing the Fock space for state production and protection. **Physical Review A**, v. 90, n. 3, p. 033840, 2014.

PG10

Seleção de bactérias termo-halofílicas produtoras de biossurfactantes a partir de rocha de reservatório de petróleo

ARGENTIN, M. N.¹; BOSSOLAN, N. R. S.¹

marcela.argentin@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Biossurfactantes são compostos tensoativos de baixo peso molecular produzidos por ampla variedade de microrganismos que, na indústria do petróleo, podem ser empregados em processos de recuperação avançada de petróleo (MEOR). (1) As condições extremas de reservatórios de petróleo demandam estudos sobre a produção de biossurfactantes por linhagens bacterianas autóctones, bem como de sua estabilidade frente a estas condições. (2) O presente trabalho teve como objetivo (a) a seleção de linhagens bacterianas produtoras de surfactantes oriundas de rochas profundas de um reservatório de petróleo *offshore* e (b) a otimização das condições de produção do biossurfactante pelos isolados. A seleção das bactérias foi feita a partir de cultivos em meio LB (Luria-Bertani) inoculados com amostras de rochas de profundidade (3.000 metros). Os cultivos foram incubados em aerobiose, à temperatura de 55°C, e testados nas salinidades de 35, 70 e 120 g/L de NaCl. O isolamento das linhagens foi feito em meio sólido nas mesmas condições e os isolados foram testados para produção de substâncias tensoativas medindo-se o índice de emulsificação (E24). De 38 isolados, 13 apresentaram produção de biossurfactante, os quais tiveram sua identificação feita pelo sequenciamento do gene DNAr 16S. Dez isolados apresentaram identidade (99%) com o gênero *Bacillus*, 1 isolado com o gênero *Pseudomonas* (97%) e 2 com o gênero *Melghirimyces* (90%). O isolado Ar70C7-2 (*Bacillus* sp) foi selecionado para estudo das melhores condições de produção e atividade do biossurfactante. Para otimização da produção do biossurfactante, utilizou-se um Meio Mineral (3) como base, testando-se diferentes relações C/N, com glicose e NaNO₃ como fontes de carbono e nitrogênio. Também foram feitos testes com diferentes fontes de carbono (glicerina, vaselina, glicose e sacarose) e de nitrogênio (NH₄Cl, NaNO₃ e NH₄NO₃). O meio adicionado de glicerina e NH₄Cl, na relação C/N igual a 2, na condição de 55°C e 70 g/L NaCl, forneceu o melhor resultado para o teste de E24 (69%). Para os testes de estabilidade, o biossurfactante foi extraído por precipitação ácida, obtendo-se, em média, 0,24g de extrato bruto (semi-purificado) por litro de cultivo. Para verificação da estabilidade térmica, as amostras foram mantidas por 24h em temperaturas que variaram de -18 a 121°C. Os índices de E24 variaram de 62,2%, a -18°C, a 69,8%, a 100°C, sendo a menor tensão superficial, 43,3 mN/m, obtida a -18°C. Para o ensaio em diferentes condições de pH, as amostras tiveram seu pH ajustado para valores no intervalo de 2 a 12, apresentando maior E24 em pH 12 - 70,4% - e mínimo em pH 2 - 65,2%, com menor tensão superficial de 44,3 mN/m em pH 2. Para o ensaio do efeito da força iônica, as salinidades das amostras foram ajustadas para concentrações no intervalo de 0 a 21% de NaCl. Os valores de E24 variaram de 61,5%, com 15%, a 70,3%, em 3%, obtendo-se menor tensão superficial 42,2 mN/m a 12% de NaCl. O biossurfactante produzido por Ar70C7-2, em condições de alta temperatura e salinidade, mostrou alto índice de emulsificação e estabilidade, sugerindo uma potencial aplicação em processos de MEOR.

Palavras-chave: *Bacillus*. Biossurfactante. Petróleo.

Referências:

- 1 BANAT, I. M.; MAKKAR, R. S.; CAMEOTRA, S. S. Potential commercial applications of microbial surfactants. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 53, n. 5, p. 495-508, 2000.
- 2 NITSCHKE, M.; PASTORE, G.M. Biossurfactantes: propriedades e aplicações. **Química Nova**, v. 25, n. 5 , p. 772-776, 2002.
- 3 AGARWAL, P.; SHARMA, D. K. Studies on the production of biosurfactant for the microbial enhanced oil recovery by using bacteria isolated from oil contaminated wet soil. **Petroleum Science and Technology**, v. 27, n. 16, p. 1880-1893, 2009.

PG11

High-performance and high-order numerical methods for 2D Navier-Stokes equations

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

vinicius.aurichio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Describing the movement of a fluid flow is a problem of interest to many areas - ranging from biology to engineering - as fluids are present in almost every physical system. This is difficult because the governing equations of motion of fluids, the Navier-Stokes equations, are non-linear. Numerical methods are then needed to treat flows as most practical situations can't be handled by analytical methods. Still, numerical simulation of a flow is a computationally intensive problem, and so the methods must be efficient as well as precise to be of any use. Historically this is accomplished by taking a precise method and implementing it efficiently; our main goal is to develop a new method while seeking efficiency from the beginning. Our efforts are focused on obtaining shock-capturing, multiscale, low-numerical dissipation methods that solve the compressible Navier-Stokes equations in 2D. So far we've studied known methods such as MacCormack and flux-splitting to guide the search. (1,2) High-order versions of these methods are of particular interest, since they allow for high-resolution with less grid points, possibly reducing the computation times. We have also implemented characteristic boundary conditions, enabling the use of inlets, outlets and walls in a compatible way. (3)

Keywords: Fluid dynamics. High-performance computing. High-order methods.

Referências:

- 1 MACCORMACK, R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. **Journal of Spacecraft and Rockets**, v. 40, n. 5, p. 757-763, 2003.
- 2 STEGER, J. L.; WARMING, R. F. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. **Journal of Computational Physics**, v. 40, n. 2, p. 263-293, 1981.
- 3 POINSOT, T. J.; LELE, S. K. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. **Journal of Computational Physics**, v. 101, n. 1, p. 104-129, 1992.

PG12

Coversão do Poli(Cloreto de tetrahidrotiofeno de xililideno) (PTHT) em Poli(P-fenileno vinileno) (PPV) via irradiação com pulsos de femtossegundos

AVILA SALAS, O. I.¹; MENDONÇA, C. R.¹

oriana@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os polímeros eletroluminescentes, denominados semicondutores orgânicos surgiram como materiais com propriedades interessantes e com grande potencial de aplicação tecnológica devido a combinação das características dos plásticos (mecânicas e de processamento) com as propriedades eletrônicas dos semicondutores inorgânicos. O poli(p-fenileno vinileno) (PPV) tem sido um dos materiais mais estudado devido ao interesse em suas propriedades de emissão de luz e as potenciais aplicações tecnológicas em dispositivos eletroluminescentes, tais como, os diodos emissores de luz (1) e células fotovoltaicas. O PPV é obtido a partir da rota de síntese química do polímero precursor solúvel, o poli(cloreto de tetrahidrotiofeno de xililideno), ou PTHT, o qual é processado na forma de filme e, submetido a uma etapa de conversão térmica pela eliminação dos grupos substituintes sulfônicos. Neste trabalho, nos propomos a realizar a conversão do polímero precursor PTHT para o PPV utilizando laser de femtossegundos. Através da focalização do feixe laser na amostra, realizada através de um objetiva de microscópio, observamos que a conversão acontece apenas em torno do volume focal, ou seja, dentro de uma região confinada no material. Assim, através da movimentação da amostra em relação ao feixe de laser é possível produzir padrões no volume, onde a região convertida no filme difere do restante do material pelo seu caráter semicondutor.

Palavras-chave: Poli(p-fenileno vinileno). Poli(cloreto de tetrahidrotiofeno de xililideno). Polímeros eletroluminescentes.

Referências:

1 BURROUGHERS, J. H. et al. Light emitting diodes based on conjugated polymers. **Nature**, v. 347, p. 539-541, 1990. doi: 10.1038/347539a0.

PG13

Estudos estruturais e funcionais das proteínas envolvidas na síntese da parede de ácidos teicóicos em *Staphylococcus aureus*

AZEVEDO, E. C.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

erikaa.chang@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, as bactérias *Staphylococcus aureus* são uma das principais causas de infecções hospitalares em todo o mundo. Isto ocorre devido à aquisição de resistência a antibióticos, em especial aos beta-lactâmicos, que nos Estados Unidos representam mais de 50% de todas as cepas de *S. aureus* isolados. (1) Estes fármacos agem pela inibição da síntese e da ligação transversal entre polímeros específicos da parede celular de bactérias, os peptidoglicanos, se ligando e acilando transpeptidases, resultando no enfraquecimento da parede celular e eventual lise da célula. A resistência é adquirida pela transferência lateral do gene *mecA*, que codifica uma nova transpeptidase que também se liga a fármacos beta-lactâmicos, porém com baixa afinidade, viabilizando células em concentrações de antibióticos que deveriam ser letais às mesmas em condições normais. Um método que tem se mostrado eficaz para combate à resistência é a combinação de fármacos durante a terapia. Em *S. aureus*, que são bactérias gram-positivas, um alvo interessante para este tipo de estratégia são enzimas glicosiltransferases que estão presentes na via de síntese da parede de ácidos teicóicos. A inibição de algumas destas enzimas mostrou re-sensibilizar bactérias resistentes, porém o mecanismo pelo qual isto ocorre ainda não está completamente elucidado. (2) Portanto, estudos funcionais e estruturais destas enzimas se mostram de grande importância para o conhecimento sobre seus mecanismos, possibilitando também a procura por moléculas inibidoras que possam ser utilizadas durante a terapia, combinadas aos compostos beta-lactâmicos. Para tal, foi escolhida uma das glicosiltransferases envolvidas na via, chamada TarA, proveniente da cepa SA16 cujo DNA genômico foi gentilmente cedido pela prof.dra. Ilana Lopes Baratella da Cunha Camargo. (3) A enzima foi estudada por métodos computacionais para avaliação da viabilidade e escolha do sistema de expressão heteróloga. Em seguida, esta foi clonada no vetor pETTRX-1a/LIC do sistema independente de ligase e transformada em bactérias *Escherichia coli* da cepa Rosetta (DE3) para que fosse realizada a expressão da proteína. Testes de condições de expressão, purificação e cristalização serão realizados posteriormente para que seja possível a obtenção de uma estrutura de alta resolução.

Palavras-chave: MRSA. *Staphylococcus aureus*. Glicosiltransferase.

Referências:

- 1 ROEMER, T.; SCHNEIDER, T.; PINHO, M. G. Auxiliary factors: a chink in the armor of MRSA resistance to beta-lactam antibiotics. **Current Opinion in Microbiology**, v. 16, n. 5, p. 538-548, 2013.
- 2 SOBHANIFAR, S. et al. Structure and mechanism of *Staphylococcus aureus* TarM, the wall teichoic acid alpha-glycosyltransferase. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 112, n. 6, p.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

E576-585, 2015. doi: 10.1073/pnas.1418084112.

3 DABUL, A. N. G.; KOS, V. N.; GILMORE, M. S.; CAMARGO, I. L. B. C. Draft genome sequence of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* strain SA16, representative of an endemic clone from a Brazilian hospital. **Genome Announcements**, v. 1, n. 5, p. e00754-1-e00754-13, 2013. doi: 10.1128/genomeA.00754-13.

PG14

Detecção de comunidades em redes complexas através de caminhadas auto-excludentes

BAGNATO, G. G.¹; RONQUI, J. R. F.¹; TRAVIESO, G.¹

guilherme.bagnato@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O estudo de estruturas de comunidades é de grande importância para várias áreas da ciência onde o sistema pode ser modelado através de uma rede complexa. Uma comunidade é definida como um conjunto de vértices que possui uma densidade de ligações maior entre si do que com o restante da rede. A detecção destes grupos é um problema em aberto devido a sua alta complexidade computacional. Contudo, devido a sua importância, muitos grupos de pesquisas interdisciplinares estão trabalhando no desenvolvimento e aprimoramento destes métodos. Neste trabalho, desenvolvemos um eficiente algoritmo para determinar a melhor distribuição de comunidades utilizando caminhadas aleatórias auto-excludentes (SAW). Nesta dinâmica, o caminhante tem a restrição de não visitar um vértice que já foi alcançado, ou seja, apresenta memória do caminho percorrido. Ao final do passeio de N caminhantes calculamos duas características importantes do SAW, a fração de caminhantes que visitaram o vértice j partindo de um vértice i , $m(i,j)$, e seu comprimento médio ao passar pelo vértice j , $\langle l(i,j) \rangle$. A partir destas duas grandezas definimos $f(i,j) = m(i,j)/\langle l(i,j) \rangle$. Quando muitos caminhantes visitam j partindo de i , em poucos passos, a probabilidade dos vértices i e j pertencerem a mesma comunidade é alta. Para melhorar a eficiência do nosso método utilizamos a análise de componente principal (PCA) para remover possíveis redundâncias em $f(i,j)$ e posteriormente classificar os vértices em comunidades por meio da clusterização hierárquica aglomerativa. A união dos grupos é feita utilizando o average linkage (UPGMA) juntamente com a dissimilaridade de Bray-Curtis como métrica. Ao final do processo determinamos a melhor configuração maximizando o parâmetro modularidade. (1) Com o intuito de validar nosso algoritmo, comparamos os resultados com redes geradas por benchmark (2) e com redes reais. (3) A qualidade da divisão que obtivemos foi superior a métodos tradicionais como walktrap, fast-greedy e edge-betweenness. Assim, nosso método mostrou-se eficiente na identificação da melhor separação em comunidades da rede através de caminhada aleatória juntamente com a PCA e a clusterização hierárquica aglomerativa. Os próximos passos deste trabalho são expandir a técnica para outros tipos de redes (direcionadas, com pesos e com mais de uma componente) além de explorar mais profundamente a dinâmica do SAW.

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

Referências:

- 1 NEWMAN, M. E. J. Modularity and community structure in networks. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 103, n. 23, p. 8577-8582, 2006. doi: 10.1073/pnas.0601602103.
- 2 LANCICHINETTI, A.; FORTUNATO, S.; RADICCHI, F. Benchmark graphs for testing community detection algorithms. **Physical Review E**, v. 78, n. 4, p. 046110-1-046110-5, 2008. doi: 10.1103/



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

PhysRevE.78.046110.

3 NEWMAN, M. E. J.; GIRVAN, M.. Finding and evaluating community structure in networks. **Physical Review E**, v. 69, n. 2, p. 026113-1-026113-15, 2004. doi: 10.1103/PhysRevE.69.026113.

PG15

A novel nanofiber/ Ag nanocapsules system for application as bactericidal materials for medical application

BALLESTEROS, C. A. S.¹; ZUCOLOTTI, V.¹; CORREA, D.²

carturosuarez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

There is an urgent need to prevent bacterial infections after surgical wounds and burns. We developed a nanofiber scaffold system based on polymeric nanocapsules containing Ag nanoparticles to be used as therapeutic materials on wounds and burns. (1) The system is activated and can release Ag nanoparticles upon applying a 405 nm laser line (10 mW). (2) The LASER excites the surface plasmon resonant of Ag Nps, changing the configuration of nanocapsule and releasing the nanoparticles. This method avoids the toxic effect of the direct interaction of Ag Nps with human skin and increases bacterial inhibition in surgical wounds. The system was characterized by scattering electron microscopy, atomic force microscopy, Fourier transform infrared and UV-Vis spectroscopies. We used gram-negative *Escherichia coli* and gram-positive *Staphylococcus aureus* for antibacterial studies. (3) Minimum inhibitory concentration (MIC) revealed the antibacterial activity of the nanocapsules solution [0,9 µg/mL], demonstrating the bactericidal effect only when the LASER is incident on the nanocapsule system. We performed the experiments under a broad range of solution concentrations and different exposition times of the laser, revealing that ca. 7 min of exposition is sufficient for Ag release. Our results suggest that the photoresponsive tissue system prepared here is suitable for biomedical applications.

Palavras-chave: Nanocapsules. Antimicrobial applications. Smart nanomaterials.

Referências:

- 1 ACHILLEOS, D. S. ; HATTON, T. Al.; VAMVAKAKI, M. Light-regulated supramolecular engineering of polymeric nanocapsules. **Journal of the American Chemical Society**, v. 134, n. 13, p. 134, 2012. doi: 10.1021/ja212177q.
- 2 GIZDAVIC-NIKOLAIDIS, M. R. et al. Characterization and antimicrobial efficacy of acetone extracted aniline oligomers. **Synthetic Metals**, v. 162, n. 13-14, p. 1114-1119, 2012. doi: 10.1016/j.synthmet.2012.04.031.
- 3 LI, Q. et al. Antimicrobial nanomaterials for water disinfection and microbial control: potential applications and implications. **Water Research**, v. 42, n. 18, p. 4591-4602, 2008. doi: 10.1016/j.watres.2008.08.015.

PG16

Estimação de parâmetros em sistemas quânticos

BARRETO, D. L.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

diogolbar@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde que foi concebida, a teoria de informação quântica tornou-se tema de grande destaque na física sendo constantemente impulsionada por avanços teóricos e experimentais. Do ponto de vista teórico a determinação precisa e exata de estados e parâmetros(1) de um sistema é de grande importância no processamento de informação quântica. Diversas quantidades de interesse em física não possuem correspondência direta com observáveis quânticos, dessa forma, qualquer procedimento para determiná-las acaba recaindo em métodos de medida indireta e, portanto, se reduzindo a um problema de estimativa. Métodos de estimativa (2) são objetos de pesquisa da chamada metrologia quântica, um campo de estudos focado em extrair informações precisas e exatas de sistemas quânticos mesmo com a presença de ruído nas medidas. Neste trabalho estudamos a aplicação dos conceitos básicos de inferência estatística (3) em um sistema quântico qualquer. Mostramos como é possível utilizar testes de hipóteses probabilísticos, já conhecidos por suas aplicações em estatística, para determinar o estado em que um sistema quântico se encontra. Também exploramos como fazer estimativas e encontrar estimadores para os parâmetros desconhecidos de um sistema qualquer de maneira eficiente.

Palavras-chave: Metrologia quântica. Inferência estatística. Informação quântica.

Referências:

- 1 HELSTROM, C. W. . **Quantum detection and estimation theory**. New York: Academic Press, 1976. 318 p.
- 2 PARIS, M. G.A . Quantum estimation for quantum technology. **International Journal of Quantum Information**, v. 7, n. supp01, p. 125, 2009. doi: 10.1142/S0219749909004839.
- 3 CASELLA, G.; BERGER, R. L. . **Inferência estatística**. São Paulo: Cengage Learning, 2011. 612 p.

PG17

Efeito da adição de dopantes e da rota de síntese nas propriedades do composto CaTiO_3

BARROS, K. L. P.¹; MASTELARO, V. R.¹

klp.barros@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos materiais nanocristalinos, o processo de dopagem tem sido considerado de fundamental importância para estabilizar determinadas fases ou faces cristalinas. A busca por novos materiais também tem sido baseada no uso de novos métodos de síntese como, por exemplo, o método hidrotermal e solvotermal. (1) Desta forma, a introdução de dopantes simultaneamente com o uso de uma metodologia de síntese versátil mostra-se como uma proposta interessante para obter materiais já produzidos por técnicas convencionais, mas que apresentam propriedades diferenciadas. O objetivo do projeto é verificar o efeito do método de síntese utilizado e da adição de íons dopantes como Mg^{2+} , Ni^{2+} e Fe^{2+} nas propriedades morfológicas e estruturais do composto CaTiO_3 que será preparado através dos métodos hidrotermal e solvotermal sem o uso de microondas. Segundo o estudo realizado por Alfredsson (2) estes íons são os mais ativos em relação as mudanças de morfologia na fase CaTiO_3 . Até o momento, foram realizados experimentos verificando o efeito dos parâmetros de síntese (tempo e temperatura) e variando-se os precursores utilizados e a metodologia de síntese, caracterização por técnicas como difração de raios X e microscopia eletrônica de varredura, assim como o efeito da substituição dos íons dopantes no sítio A (Ca) e no sítio B (Ti). Futuramente serão realizados testes sobre a atividade catalítica e da sensibilidade ao gás ozônio das amostras obtidas.

Palavras-chave: CaTiO_3 . Síntese hidrotermal. Dopantes.

Referências:

- 1 ALFREDSSON, M. et al. Dopant control over the crystal morphology of ceramic materials. **Surface Science**, v. 601, n. 21, p. 4793-4800, 2007.
- 2 YANG, X. et al. Formation mechanism of CaTiO_3 hollow crystals with different microstructures. **Journal of the American Chemical Society**, v. 132, n. 40, p. 14279-14287, 2010.

PG18

Comparative study between 8×8 and 6×6 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonian: the case of GaAs zinc blende

BASTOS, C. M. O¹; SABINO, F.¹; FARIA JUNIOR, P. E¹; CAMPOS, T¹; SILVA, J. L. F. da²; SIPAHI, G. M.¹

cmobastos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Nowadays, electronic structure calculations based on quantum-mechanics is of fundamental importance for the development of new materials and for the understanding of new phenomena in solid state physics. One of the most successful first-principles or 'ab-initio' approaches, the density functional theory (DFT), employs the electron density as the fundamental variable. Although the DFT framework (Kohn-Sham equations) has been widely applied to the study of molecules, clusters, nanoparticles, surfaces, and bulk materials, those calculations are restricted to small systems, and hence, the study of systems such as quantum wells, wires and dots with thousand or million atoms are far from possible due to its computational cost. An alternative approach for confined systems is the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method. The $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ formalism is based on building an Hamiltonian by using perturbation theory around a point of the reciprocal space. The perturbation approach may be further enhanced by using the Löwdin perturbation scheme, which consists in dividing the states in two classes: A and B, where the states of class A are chosen as the basis of the Hamiltonian and the class B all other states. The interaction of states of the class A are taken into account exactly as the interactions among states from both classes are described as perturbative terms in class A states. The symmetries of the crystalline phase are then taken into account in the Hamiltonian through group theory analysis and according to the choices of class A states and the order of the perturbation, different Hamiltonians can be built for the same crystalline phase. In the general case, the Hamiltonian matrix elements can be obtained by fitting the parametrized elements to a previously obtained band structure. This can be done by comparing the analytical coefficients of the secular equation to the numerical values obtained from the calculated band structure. (1) Lastly, we did not find in the literature a study of the validity Hamiltonian and its parameters. The accuracy of the parameters is a key point, since the agreement of the two different methods would allow that the results using the much less computer intensive method directly comparable to the previous one and its findings. In this study, we analyse two different $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ Hamiltonians: the 6×6 proposed by Luttinger and Kohn (2) and the 8×8 Hamiltonian proposed by Kane. (3) After obtaining the parameters for both Hamiltonians we analyse the validity of their models around Γ -point for a bulk zinc blende GaAs system obtained by hybrid HSE-DFT calculation. We show that the agreement of the 8×8 Hamiltonian is enforced for a larger region enclosing Γ -point than the 6×6 one. Properties depending on an extended range of band energy values may be more precisely described by the first.

Keywords: $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method. DFT. Semiconductors.

Referências:

- 1 BASTOS, C. M. de O. **Determinação de parâmetros para Hamiltonianos $k.p$ a partir de estruturas de bandas pré-existentes.** 2015. 97p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.
- 2 LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. **Physical Review**, v. 97, n. 4, p. 869-883, 1955. doi: <http://doi.org/10.1103/PhysRev.97.869>.
- 3 KANE, E. O. Band structure of indium antimonide. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, v. 1, n. 4, p. 249-261, 1957. doi: [http://doi.org/10.1016/0022-3697\(57\)90013-6](http://doi.org/10.1016/0022-3697(57)90013-6).

PG19

O uso de abordagens histórica e investigativa na reelaboração de roteiros sobre calor e alavancas da Experimentoteca do CDCC-USP

BATISTA, R. F. M.¹; SILVA, C. C.¹

tata.fis@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No Brasil, as mudanças necessárias para a atualização dos currículos de física já são discutidas por pesquisadores das áreas de ensino de ciências há várias décadas. A Física é ensinada de forma inadequada, com ausência de atividades experimentais; ênfase em memorização de equações, símbolos, nomes e teorias e sem vínculo entre a matéria e o cotidiano do aluno. Na década de 1990, novas abordagens para o ensino de ciências foram sugeridas através da Lei de Diretrizes e Bases (LDB) e dos Parâmetros Curriculares Nacionais (PCN). Entre os enfoques sugeridos estão o uso da história e filosofia da ciência (HFC), pois os resultados científicos podem ser compreendidos como construções ao longo da história, influenciado por questões culturais, sociais e econômicas. (1) Outra abordagem bastante defendida é o ensino por investigação (EI), que se caracteriza por atividades problematizadoras, que podem ou não conter atividades experimentais. O ensino investigativo visa tornar o aluno protagonista da aula, buscando respostas para situações propostas, permitindo a construção de conceitos, modelos, teorias e fazendo-o refletir e não apenas ter uma lembrança vaga e breve dos conceitos científicos. (2) Nessa pesquisa, a história da ciência é usada aliada ao EI visando motivar e ensinar conceitos científicos de uma forma mais crítica, explicitando dificuldades e conquistas, e contextualizando os conteúdos trabalhados. Ademais, a união entre EI e HFC propicia momentos de discussão e argumentação, tanto escrita quanto oral, facilitando a atividade cognitiva e metacognitiva, a criatividade e o pensamento reflexivo. Porém, o uso de abordagens históricas e investigativas no ensino da Física não é algo simples e os vários aspectos envolvidos precisam ser mais bem investigados. Além da pesquisa histórica e epistemológica, a investigação acerca dos aspectos didático-metodológicos é essencial para fundamentar como abordagens históricas podem ser inseridas no processo educacional. Portanto, o objetivo do presente trabalho é propor alternativas de passar do discurso da historicidade para sua prática em sala de aula, considerando-a como uma estratégia didática aliada ao ensino experimental investigativo. Serão desenvolvidas sequências de ensino-aprendizagem (SEAs) em parceria com professores em serviço, de modo a valorizar o saber docente. Como ponto de partida, trabalharemos com os roteiros dos kits de experimentos de física já existente na Experimentoteca do Centro de Divulgação Científica e Cultural da Universidade de São Paulo (CDCC/USP - localizado em São Carlos). Atualmente, os roteiros seguem uma abordagem conhecida como "cookbook", que limita o envolvimento e desenvolvimento cognitivo dos alunos. Adotamos como metodologia de desenvolvimento os ciclos de reflexão, metodologia para trabalhos colaborativos; e como referencial de análise, o Losango Didático, proposto por Méheut e Psillos (3), que considera as dimensões epistêmica e pedagógica dos saberes escolares no processo de ensino-aprendizagem. Nessa apresentação discutiremos a fundamentação teórica e resultados obtidos na elaboração de roteiros sobre calor e alavancas.

Palavras-chave: Ensino investigativo. História da ciência. Atividades experimentais.

Referências:

- 1 SILVA, C. C.; MARTINS, R. A. A teoria das cores de Newton: um exemplo do uso da história da ciência em sala de aula. **Ciência e Educação**, v. 9, n. 1, p. 53-65, 2003.
- 2 CARVALHO, A. M. P.; GIL-PÉREZ, D. **Formação de professores de ciências:** tendências e inovações. São Paulo: Cortez, 1993. 128 p.
- 3 MÉHEUT, M.; PSILLOS, A. Teaching learning sequences: aims and tools for science education research. **International Journal of Science Education**, v. 26, n. 5, p. 515-535, 2004.

PG20

Selenium metabolism and biosynthesis of selenocysteine in *Naegleria gruberi*

BELLINI, N. K.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

nkbellini@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The selenium intake into metabolism involves the selenocysteine (Sec) biosynthesis, which is incorporated co-translationally into the proteins. These proteins are named selenoproteins and their functions in cell growth and redox balance have been extensively studied.(1) In order to improve the understanding of the selenocysteine pathway mechanism in a primitive eukaryote, we have chosen *Naegleria gruberi* as the focus of our studies. This gender includes free-living amoebas that developed an adaptive strategy consisting of cells differentiation to flagellate and cystic form to survive in adverse conditions. In this work, we are interested in the selenium metabolism involved in these strategies and how the selenoprotein production is modulated to favour the survival of *N. gruberi*. All potential genes related to the Sec pathway were identified in genome of *N. gruberi*, including the selenophosphate synthetase (SPS2) enzyme that is essential to Sec incorporation because of its capability of producing the selenium active form. Two gene fusions were previously reported in the N-terminal domain of SPS: a methyltransferase protein, which is most likely involved in selenium cell detoxification (2), and recently a Cys sulfinase (NifS) protein that decomposes L-selenocysteine into L-alanine and elemental selenium. (3) This selenium is used by the SPS domain ATP-depending to produce selenophosphate and generate Sec. The behavior of SPS in vivo is going to be studied, in this work, to better understand its fusion with NifS protein. RT-PCR and sequencing will be developed to confirm that the genes have been transcribed in fusion. To test the functionality of SPS2/NifS in selenocysteine biosynthesis, it will be designed the genetic functional complementation experiments in *Escherichia coli* deficient in Seld and NifS activity. The investigation of native protein in the *N. gruberi* cultures of amoeba, cysts and flagellates will be developed after the polyclonal antibodies production against *N. gruberi* SPS2 and NifS recombinant protein. To study the selenium metabolism and investigate the possible selenium carrier it will be used an integrate analysis that includes the transcriptome and proteomic analyzes with the RNA-Seq and mass spectroscopy, respectively. Among the biochemical and biophysical approach with the recombinant proteins, we are planning the oligonucleotides to construct the gene SPS2-NifS and the isolated chimeras SPS and NifS. Then, after expressing and purifying in high yield, it will be performed the activity assays using the selenite as reaction substrate and we will be able to measure the AMP production in High Performance Liquid Chromatography (HPLC). Moreover it will be realized Isothermal Titration Calorimetry (ITC) to determine the binding affinity (K_a) and other thermodynamic parameters of interactions between NifS and SPS2 in solution, including the comparison when selenite is added.

Keywords: Selenocysteine. SPS2-NifS. *Naegleria gruberi*.

Referências:

- 1 PAPP, L. V. et al. From Selenium to selenoproteins: synthesis, identity, and their role in human health. **Antioxidants & Redox Signaling**, v. 9, n. 7, p. 775-806, 2007.
- 2 SILVA M.T.A. et al. Selenocystein biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology** , v. 188, n. 2, p. 87-90, 2013.
- 3 MARIOTTI, M. et al. Evolution of selenophosphate synthetases: emergence and relocation of function through independent duplications and recurrent subfunctionalization. doi: 10.1101/gr.190538.115.

PG21

Band Gap engineering in the chalcogenide semiconductors $\text{Cs}_2\text{M}^{II}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$: the role of hybrid density functional theory

BESSE, R.¹; SABINO, F. P.¹; SILVA, J. L. F.²

rafael.besse@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

The search for semiconductors with suitable properties for specific applications is of great importance. For example, semiconductors with band gaps between 1.0 eV and 1.5 eV are optimal candidates for use as solar-cell absorbers, while semiconductors with wide band gaps (> 1.6 eV) are required for high energy radiation detection. Given the large variety of possible chemical compositions and crystal structures, theoretical calculations can be of great use to guide the search for new materials through an initial screening and characterization of candidate compounds, as an effort to avoid the more laborious and costly experimental analysis. Density functional theory (DFT) has been the most important framework to calculate materials properties, as it achieves good results with a reasonable cost for several classes of systems. However, the widely used generalized gradient approximation of the exchange-correlation functional by Perdew, Burke and Ernzerhof (GGA-PBE) is known to largely underestimate band gaps in semiconductors, and therefore alternative approaches have been used to overcome this issue. One of them is the hybrid functional HSE06, proposed by Heyd, Scuseria and Ernzerhof, which includes 25% of exact exchange in the short range part, with a range separation parameter of $0.11 a_0^{-1}$. (1) The use of this functional leads to band gap values in closer agreement with experimental results, but in general has larger computational cost. In this work, we address the effects of inclusion of HSE06 in the calculation of band gaps of the chalcogenide semiconductors $\text{Cs}_2\text{M}^{II}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$ ($\text{M}^{II} = \text{Mg, Zn, Cd, Hg}$; $\text{M}^{\text{IV}} = \text{Ge, Sn}$; $\text{Q} = \text{S, Se, Te}$). The first 11 members of this family have been recently synthesized (orthorhombic structure, space group $\text{P}2_12_12_1$, 4 formula units per unit cell) and have measured band gaps from 1.0 eV to 3.4 eV, which suggests the possibility of band gap engineering. (2) To calculate the band gaps we initially optimized the crystal structures of the 24 possible compositions, employing the PBE functional and also including the Tkatchenko-Scheffler van der Waals correction with self-consistent screening (TS+SCS) because of the layered crystal structure of the materials. Band gaps calculated with PBE decrease when the atomic number of the Q species is increased, and are approximately linearly correlated with unit cell volume, in agreement with the experimental trends. However, calculated values underestimate measured band gaps in a range from 25% to 60%. When HSE06 is used, the trends are not affected but the band gaps are increased and achieve better agreement with experimental values. In particular, when the structures optimized with PBE are used, the differences are smaller than 0.1 eV for 8 of the experimentally studied materials. Therefore, our results can be used as good predictions of the band gaps of the compounds not synthesized. Computational times for calculations with HSE06 are 100 to 300 times larger than PBE calculations, using the same calculation setup, because of increased cost and the slower convergence of the calculations.

Keywords: Band gap. Density functional theory. Chalcogenides.

Referências:

- 1 HEYD, J.; SCUSERIA, G. E.; ERNZERHOF, M. Hybrid functionals based on a screened coulomb potential. **Journal of Chemical Physics**, v. 118, n. 18, p. 8207-8215, 2003.
- 2 MORRIS, C. D. et al. $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}_3^{\text{IV}}\text{Q}_8$ (Q = S, Se, Te): an extensive family of layered semiconductors with diverse band Gaps. **Chemistry of Materials**, v. 25, n. 16, p. 3344-3356, 2013.

PG22

O limite termodinâmico do modelo de Axelrod unidimensional de dois estados

BIRAL, E. J. P.¹; FONTANARI, J. F.¹

eliasbiral@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O modelo de Axelrod (1), proposto pelo cientista político Robert Axelrod, é um modelo no qual são estudadas interações locais entre agentes simples, que levam a um comportamento global do sistema e busca responder à pergunta: "Se interagimos com nossos semelhantes e, com a interação ficamos mais semelhantes, porque existem diferenças culturais em uma população?". Nesse modelo cada pessoa ou grupo é tratado como um elemento de matriz que possui uma lista de F características, cada uma com q traços. Essa lista de números corresponde à identidade cultural da pessoa em questão. A dinâmica do modelo é aleatória, sendo sorteado um agente, é então sorteado um vizinho e na interação uma determinada característica do vizinho é sobreposta no sítio inicialmente sorteado. Deve-se obedecer à regras de interação de modo que somente interagem agentes com alguma característica em comum e quanto mais similares os mesmos forem, maior a probabilidade de interação entre eles. Ao final das interações, o modelo entra em um estado absorvente no qual podemos observar uma convergência monocultural, na qual todos os sítios possuem a mesma cultura, i.e., a mesma lista de números, ou convergência multicultural, na qual existem grupos de culturas distintas na matriz final. Porém, no modelo unidimensional com $F=q=2$, simulações de Monte Carlo mostram que existem convergências monoculturais em cerca de 30% dos casos, enquanto que resultados analíticos mostram que convergências monoculturais ocorrem sempre. (2) Nesta tese, estudamos o comportamento do modelo de Axelrod unidimensional para $F=q=2$ utilizando simulações de Monte Carlo. Nós mostramos que a aparente discrepância entre os resultados computacionais e os resultados matemáticos é explicada pela comutação de limites do tamanho da rede $L \rightarrow \infty$ e o tempo de interação $\tau \rightarrow \infty$. (3) Esses resultados corroboram para uma melhor clareza do modelo em questão e promovem a importância da concordância de teoria e simulações na ciência.

Palavras-chave: Modelo de Axelrod. Física estatística. Disseminação de cultura.

Referências:

- 1 AXELROD, R. The dissemination of culture: a model with local convergence and global polarization. **Journal of Conflict Resolution**, v. 41, n. 2, p. 203-226, 1997.
- 2 LANCHIER, N. The Axelrod model for the dissemination of culture revisited. **Annals of Applied Probability**, v. 22, n. 2, p. 860-880, 2012.
- 3 BIRAL, E. J. P.; TILLES, P. F. C.; FONTANARI, J. F. The consensus in the two-feature two-state one dimensional Axelrod model revisited. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2015, n. 4, p.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

P04006-1-P04006-10, 2015. doi: 10.1088/1742-5468/2015/04/P04006.

PG23

Caracterização estrutural e funcional da enzima XaFold: planejamento de inibidores da biossíntese de folatos

BUNEO, R. V.¹; MALUF, F. V.¹; GUIDO, R. V. C.¹

renata.bueno@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A escaldadura das folhas, causada pela bactéria *Xanthomonas albilineans*, é uma das cinco fitopatologias com maior impacto sobre a cultura da cana-de-açúcar, causando significativa diminuição da produtividade, necessidade de reforma precoce dos canaviais e queda da qualidade do caldo extraído. (1) A ausência de agentes químicos ou biológicos para o controle dessa fitopatologia estimula a descoberta e o desenvolvimento de moléculas bioativas candidatas a novos agroquímicos. Nesse sentido, a biossíntese de folatos é uma via metabólica interessante para o planejamento de novas moléculas inibidoras, e a enzima bifuncional *N*5,*N*10-metilenotetrahidrofolato desidrogenase ciclohidrolase (Fold) destaca-se como um alvo molecular promissor, uma vez que está envolvida na síntese de proteínas e DNA. Diante do exposto, o atual projeto de pesquisa visa a elucidação estrutural e a caracterização funcional da Fold de *X. albilineans* (XaFold) visando o planejamento de inibidores potentes e seletivos da via de biossíntese de folatos. Para tanto, foram conduzidos estudos integrados em biologia molecular estrutural e química medicinal. Após a clonagem da sequência codificante de XaFold e expressão heteróloga, (2) foi estabelecido um protocolo de purificação composto por etapas sequenciais de cromatografia por afinidade e de exclusão por massa molecular. Para cada litro de expressão foram obtidos 60 mg de proteína com elevado teor de pureza (> 95%). A triagem de condições de cristalização foi realizada a partir de quatro concentrações de XaFold (3; 5; 7,5; 10 mg/mL), empregando-se a técnica de difusão de vapor e matriz esparsa. Para a triagem foram utilizados kits comerciais da Hampton Research (Index; Crystal Screen e Crystal Screen Cryo), Qiagen (Classic; Classic II; PEGs; JCSG Core Suite I, II, III e IV) e Molecular Dimensions (Morpheus). As gotas de cristalização foram montadas manualmente, com o auxílio de micropipetas multicanais. Após a triagem e otimização das condições de cristalização, cristais adequados para estudos de difração de raios X foram obtidos. Após a coleta e o processamento dos dados, a estrutura 3D da XaFold foi elucidada pelo método de substituição molecular à 2,1 Å de resolução. Para tanto, foram empregadas diferentes estratégias para a recuperação das fases iniciais utilizando como molde a enzima homóloga de *E. coli*. Ao final do processo foi gerado um modelo satisfatório, o qual está em fase de refinamento para depósito no *Protein Data Bank*. A análise estrutural revelou uma proteína constituída por 11 hélices alfa e 9 fitas beta distribuídas em um domínio N-terminal catalítico e um domínio C-terminal de ligação ao dinucleotídeo. Além disso, o delineamento do ensaio cinético para a caracterização da atividade desidrogenase da XaFold revelou o valor de K_M para o substrato *N*5,*N*10-THF ($K_M = 50 \pm 10 \mu M$) e cofator NADP⁺ ($K_M = 668 \pm 81 \mu M$). Os dados de caracterização estrutural e funcional da enzima Fold de *X. albilineans* serão explorados para a descoberta e planejamento de inibidores enzimáticos seletivos e potentes como candidatos a novos agroquímicos para o controle da escaldadura das folhas na cultura da cana-de-açúcar.

Palavras-chave: Cana-de-açúcar. Agroquímicos. Escaldadura das folhas.

Referências:

1 BIRCH, R. G. *Xanthomonas albilineans* and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p. 1-11, 2001.

2 ASLANIDIS, C.; JONG, P. J. Ligation independent cloning of PCR products. **Nucleic Acids Research**, v. 18, n. 20, p. 6069-6074, 1990.

PG24

Avaliação da terapia fotodinâmica e o uso da fluorescência em um modelo tumoral em membrana corioalantóica

BUZZA, H. H.¹; ZANGIROLAMI, A. C.¹; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

hilde.buzza@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica (PDT, do inglês Photodynamic Therapy) é um tratamento que vem tendo grandes avanços ao longo dos anos para diversas doenças, incluindo o câncer. Ela consiste na interação entre luz de um comprimento de onda específico, uma substância fotossensível e o oxigênio molecular. (1) O fotossensibilizador é ativado pela luz, transformando o oxigênio da célula em oxigênio singlete, que é citotóxico e, portanto, leva à morte celular. (2) Nesse contexto, o uso do modelo de membrana corioalantóica em ovos de galinha (CAM, do inglês Chorioallantoic Membrane) permite acesso direto aos vasos sanguíneos, além de não causar nenhum tipo de dor animal. Esse ambiente vascularizado é ideal para o entendimento individualizado do efeito fotodinâmico nos vasos sanguíneos. Com o desenvolvimento de um tumor nessa membrana, é possível visualizar a interação entre as células tumorais e a rede vascular, facilitando o entendimento dos mecanismos que envolvem seu crescimento e destruição. (3) As células tumorais empregadas para o desenvolvimento desse modelo podem ser de diversas linhagens e variadas formas de aplicação, desde a injeção de culturas celulares à aplicação de pedaços de biópsias. Foi escolhido trabalhar com tumor de Ehrlich pela facilidade de manuseio laboratorial, variando a aplicação do fotossensibilizador em tópica e intravenosa. Se o fotossensibilizador possui uma fluorescência diferente das outras estruturas do modelo, é possível acompanhar, por imagem, sua difusão pelos vasos sanguíneos até atingir o tumor e, com o uso de microscopia confocal, comprovar a sua localização. Para isso, foram usados dois compostos: o ALA, precursor da Protoporfirina IX (PpIX), e o Photogem®. Imagens por fluorescência foram feitas a cada 30 minutos para o entendimento da farmacodinâmica dos fotossensibilizadores, ambos com fluorescência vermelha quando excitados com luz azul. As áreas de interesse na imagem foram selecionadas e submetidas a uma rotina do software Matlab® para quantificação da fluorescência vermelha ao longo do tempo e os valores correspondentes foram plotados e relacionados ao tempo. Com os gráficos obtidos, foi determinado o tempo de incubação em 4 horas para a aplicação tópica e, então, foi aplicada a luz utilizando o laser de diodo em 635 nm com irradiância de 100mW/cm² durante 10 minutos, totalizando uma dose de 60 J/cm². Com o uso do ALA, foi possível acompanhar a formação da PpIX nos vasos sanguíneos e no tumor, mostrando o acúmulo preferencial nas células tumorais. Diferentemente do ALA, o Photogem® já é a molécula de interesse e, por isso, é possível acompanhar a sua difusão pelo modelo tumoral e também acúmulo nessa região. Com a aplicação da PDT, ambos os fotossensibilizadores foram consumidos e houve uma destruição tanto da malha vascular ao redor quanto do próprio tumor, mostrando grande potencial de tratamento para o câncer. Sendo um dos elementos fundamentais para que a PDT aconteça, o entendimento da interação do fotossensibilizador com as células e com os vasos sanguíneos é um dos caminhos para a melhoria direta na aplicação clínica dessa modalidade terapêutica.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Membrana corioalantóica. Modelo tumoral.

Referências:

- 1 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S.. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. 61-109, 2008. doi: 10.1088/0031-9155/53/9/R01.
- 2 DOUGHERTY, T. J. et al.. Review: photodynamic therapy. **Journal of the National Cancer Institute**, v. 90, n. 12, p. 889-905, 1998.
- 3 STATON, C. A. et al. Current methods for assaying angiogenesis in vitro and in vivo. **International Journal of Experimental Pathology**, v. 85, n. 5, p. 233-248, 2004.

PG25

Study and development of spherical harmonics based methods for ligand similarity analysis

CAIRES, F. R.¹; MONTALVÃO, R. W.¹

fernando.caires10@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Drugs created by drug design process have shown good results against many current diseases. Designed to bind to a specific protein site and provide a therapeutic effect, they play a central role in studies of molecular recognition, which drives all process in life. The binding procedure is based on geometric and electrostatic complementary. Evolutionary studies suggest that proteins have optimized geometric and biochemical properties of their binding sites to become more specific and catalytic to complement substrate. (1) Furthermore, it is reasonable to assume that protein sites which bind to similar ligand should have same physical and chemical properties what suggests that geometric complementary has a central theme in molecular recognition. Many approaches have been used to describe ligand's surfaces and all of them have advantages and disadvantages. Here we described Lira, a Spherical Harmonics method for ligand similarity analysis. Spherical harmonics are the angular portion of a set of solutions to Laplace's Equation and have been employed with success in shape description, protein-protein interaction and molecular surface visualization, an efficient tool to model surfaces and shapes. They form a complete and orthonormal basis in which any function in spherical coordinates can be described uniquely to any required level of detail. Lira is used to search at DUD-E database for the most similar molecular to a given query using L1 and L2, rotationally invariant representation (2), descriptors classified by Euclidean Distance. PCA analysis was performed to identify which are the most representative descriptors of LIRA and the best subspace which describes our data. Beyond that, a benchmarking is performed as a validation tool where LIRA was compared with USR (Ultrafast shape recognition) (3) and results are shown in ROC curves. An website was developed to show Lira metrics and make the search easier to find good start molecules to drug design process.

Keywords: Spherical Harmonics. Ligands similarity. shape descriptor.

Referências:

- 1 MORRIS, R. J. An evaluation of spherical designs for molecular-like surfaces. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 24, n. 5, p. 356-361, 2006.
- 2 RITCHIE, D. W.; KEMP, G. J. L. Fast computation, rotation, and comparison of low resolution spherical harmonic molecular surfaces. **Journal of Computational Chemistry**, v. 20, n. 4, p. 383-395, 1999.
- 3 BALLESTER, P. J. Ultrafast shape recognition: method and applications. **Future Medicinal Chemistry**, v. 3, n. 1, p. 65-78, 2011.

PG26

Expressão heteróloga de enzima arabinofuranosidase de *Thielavia terrestris* envolvida na degradação da biomassa lignocelulósica

CAMARGO, S.¹; MUNIZ, J. R. C.¹; POLIKARPOV, I.¹

suelen.camargo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As constantes modificações climáticas são uma das consequências de sérios problemas ambientais no planeta, dentre elas, o aquecimento global. Este se trata de um fenômeno intensificado pela grande quantidade de poluentes lançados na atmosfera, sobretudo devido a queima de combustíveis fósseis. A principal ação afirmativa que possibilita diminuir a emissão de dióxido de carbono é o uso de bicomcombustíveis renováveis, como o caso do etanol. O Brasil encontra-se como segundo maior produtor de etanol mundialmente, além de ser considerado um dos líderes na sustentabilidade em criação de bicomcombustíveis, sendo o seu insumo agrícola a cana de açúcar. O objetivo principal desse projeto é a produção de enzimas capazes de degradar a matéria prima, no caso, cana de açúcar. Para que rendimentos consideráveis na produção desta seja alcançado (maiores quantidades de açúcares fermentáveis para produção de álcool), é necessário uma potencialização na degradação da biomassa (parte não aproveitada devido à difícil degradação, por conta da recalcitrância oferecida pela parede celular vegetal). A produção de enzimas capazes de degradar a biomassa vegetal é feita por microrganismos como fungos e bactérias, em especial o fungo *Thielavia terrestris*, um organismo termófilo capaz de produzir hidrolases quando em contato com a celulose. (1,2) Realizaremos a expressão heteróloga em bactéria e a caracterização de uma α -L-arabinofuranosidase de *Thielavia terrestris* com a finalidade de estudar as enzimas responsáveis pela degradação completa da celulose, em especial da família GH62, as quais intensificam a ação de celulasas. (3) A proteína estudada será submetida a diferentes ensaios bioquímicos que comprovem e avaliem sua atividade catalítica em condições diferenciadas, além de ensaios da estabilidade da proteína em solução, que garantam uma melhor cristalização; avaliando-se diferentes valores de temperatura e pH; a fim de se auxiliar no melhoramento da produção de coquetéis enzimáticos, uma diretriz para o álcool celulósico.

Palavras-chave: Biomassa. Hidrolase. Etanol.

Referências:

- 1 LANGSTON, J. A. et al. Cloning, expression, and characterization of a cellobiose dehydrogenase from *Thielavia terrestris* induced under cellulose growth conditions. **Biochimica et Biophysica Acta**, v. 1824, n. 6, p. 802-812, 2012.
- 2 BERKA, R. M. et al. Comparative genomic analysis of the thermophilic biomass-degrading fungi *Myceliophthora thermophila* and *Thielavia terrestris*. **Nature Biotechnology**, v. 29, p. 922-927, 2011. doi: 10.1038/nbt.1976.

3 GONÇALVES, T. A. et al. Functional characterization and synergic action of fungal xylanase and arabinofuranosidase for production of xylooligosaccharides. **Bioresource Technology**, v. 119, p. 293-299, 2012. doi: 10.1016/j.biortech.2012.05.062.

PG27

Photodynamic therapy on hairless mice photoaged skin: single and fractionated illumination

CAMPOS, C. P.¹; JORGE, A. E.²; D'ALMEIDA, C. P.¹; KURACHI, C.¹

carolina.paula.campos@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Física - UFSCAR

Photoaging is a skin condition resulting from the overlap of chronological aging and the effects of chronic exposure to sunlight ultraviolet (UV). Photodamaged skin is more susceptible for the development of pre-cancerous lesions, which can become skin cancer. (1) Therefore, the treatment of this condition is not only of aesthetic concern but it is also of preventive nature. Photodynamic therapy (PDT) is a technique based on the photoactivation of a light-sensitive molecule, which, in the presence of oxygen, produces cytotoxic species that lead to cell death and tissue necrosis. (2) This technique has been used in clinical trials for treatment of photoaged skin, and it has presented good functional and cosmetic results. There are many variations on PDT parameters such as the light source, dose and type of photosensitizer. Fractionated PDT is one these variations which uses a dark interval between light fractions. Studies have shown that this illumination scheme enhances the therapeutic efficacy, although its effects in the treatment of photoaged skin are still unknown. (3) In this work, a protocol was developed to compare the outcome of PDT with single and fractionated illumination applied in photoaged skin. The assessment was made by histology and by the optical technics: steady state and lifetime fluorescence spectroscopy. Photoaging was induced in hairless mice skin which were then treated with violet LED (404 nm) and 20% ALA cream (1h of incubation) with either single (1 J.cm^{-2}) or fractionated (2 fractions of 0.5 J.cm^{-2} and 10 min of dark interval) doses. The effect of fractionated PDT was more intense, causing ulcerations on the skin and distinctive histological changes. This result shows that PDT with fractionated illumination was not suitable for the treatment of photoaged skin. The analysis by fluorescence lifetime spectroscopy investigated the cellular metabolism through the fluorophores NADH and FAD. The technic was able to reveal changes during the recovery weeks. It was not possible to correlate these changes directly with those two fluorophores. Nevertheless, it is believed that this information comes from the epidermis due to the remodeling observed in this layer.

Keywords: Photodynamic therapy. Photoaging. Fractionated illumination.

Referências:

- 1 RABE, J. H. et al.. Photoaging: mechanisms and repair. **Journal of the American Academy of Dermatology**, v. 55, n. 1, p. 1-19, 2006. doi: 10.1016/j.jaad.2005.05.010.
- 2 CASTANO, A. P. et al.. Mechanisms in photodynamic therapy: part one - photosensitizers, photochemistry and cellular localization. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 1, n. 4,

p. 279-293, 2004. doi: 10.1016/S1572-1000(05)00007-4.

3 DE HAAS, E. R M et al.. Fractionated illumination significantly improves the response of superficial basal cell carcinoma to aminolevulinic acid photodynamic therapy. **The Journal of investigative dermatology**, v. 126, n. 12, p. 2679-2686, 2006. doi: 10.1038/sj.jid.5700460.

PG28

Edge conduction in HgTe/CdTe quantum wells in the presence of perpendicular magnetic fields

CANDIDO, D. R.¹; PENTEADO, P. H.¹; EGUES, J. C.¹

denisricardocandido@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Topological insulators (TIs) are a new class of materials that behave like metals and insulators at the same time. The 2D topological insulating phase was first discovered in HgTe/CdTe quantum wells and its low-energy physics is described by the Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) model. (1) This model exhibits trivial (non-topological) and non-trivial (topological) insulating phases depending on the sign of the Dirac mass. In this work, we investigate the BHZ model taking into account the effect of the spin-orbit interactions of the Rashba and Dresselhaus types in the presence of a perpendicular Zeeman field and Landau levels. By using the finite difference method, we numerically study the behavior of the helical edge states as a function of the magnetic field and find that these persist, below a critical field (2), even in the presence of the time-reversal breaking magnetic field. Our next step is to calculate transport properties, e.g. conductance, of this system and investigate the unexpected edge conduction, above the critical field, experimentally observed in Ref. (3) This work was supported by FAPESP, CNPq, and the PRP NAP Q-NANO initiative.

Keywords: Topological insulators. BHZ model. HgTe/CdTe quantum wells.

Referências:

- 1 BERNEVIG, A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S. C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. **Science**, v. 314, n. 5806, p. 1757, 2006.
- 2 SCHARF, B.; MATOS-ABIAGUE, A.; FABIAN, J. Magnetic properties of HgTe quantum wells. **Physical Review B**, v. 86, n. 075418, p. 2, 2012.
- 3 MA, E. Y. et al. Unexpected edge conduction in mercury telluride quantum wells under broken time-reversal symmetry. **Nature Communications**, v. 6, n. 7252, p. 10, 2015.

PG29

De estados quase-estacionários a fases multi-absorventes em um modelo de crescimento unidimensional.

CARVAJAL JARA, D. A.¹; ALCARAZ, F. C.¹

dacj1984@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Em processos estocásticos de não equilíbrio a teoria de criticalidade auto-organizada (SOC) tem sido aplicada para estudar diversos sistemas como terremotos, dinâmica neural, redes elétricas, explosões solares, fusão nuclear, incêndios florestais, colisões de trânsito, tempestades magnetosféricas, avalanches de neve, e crescimento de superfícies entre outros.(1) Nestes processos, também são estudados transições em estados absorventes como acontece em algumas reações químicas ou com difusão de uma doença por contato direto, quando a taxa de recuperação e transmissão da doença são iguais.(2) No presente trabalho, estudamos um modelo de não equilíbrio de crescimento de superfície. Sendo este unidimensional, com absorção local e dessorção não local.(3) O diagrama de fase é caracterizado por dois parâmetros, um controlando a correlação temporal e o outro descrevendo a razão entre as taxas de absorção e dessorção. Dependendo dos parâmetros, o modelo estocástico exibe criticalidade auto-organizada, estados quase-estacionários, transições em estados multi-absorventes, fases rugosas e comportamentos massivos. Dois limites são de especial interesse: o primeiro quando as taxas de absorção e dessorção são iguais correspondendo com um modelo de crescimento invariante conforme. O segundo divide a região com estados quase-estacionários da região com múltiplos estados absorventes aparecendo como uma linha crítica no diagrama de fases. No caso de não absorção, a dinâmica da superfície pode ser derivada analiticamente e exibe uma dinâmica transiente cuja escala de tempo é muito maior do que o tempo de vida esperado $1/E_1$, com E_1 o gap de energia. Esta escala de tempo se comporta como um "critical initial slip" e depende fortemente do tamanho do maior cluster na condição inicial. Isso destaca a necessidade de controlar o tamanho típico dos clusters nas condições iniciais, caso contrário, a estimativa dos expoentes dinâmicos podem ser incorretos. Finalmente, observa-se desvios da torre conforme no caso de não absorção, quando se investiga a transição crítica entre a fase absorvente e fase multi-absorvente.

Palavras-chave: Modelos estocásticos de não equilíbrio. Teoria de campos conforme. Criticalidade auto-organizada SOC.

Referências:

- 1 ASCHWANDEN, M. J. **Theoretical models of self-organized criticality (SOC) systems**. Disponível em: <arXiv preprint arXiv:1204.5119>. Acesso em: 01 set. 2015..
- 2 HINRICHSSEN, H. Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. **Advances in physics**, v. 49, n. 7, p. 815-958, 2000. doi: 10.1080/00018730050198152.
- 3 ALCARAZ, F.C.; RITTENBERG, V. From conformal invariance to quasistationary states. **Journal of**



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Statistical Mechanics, v. 2011, p. P09030, 2011. doi: 10.1088/1742-5468/2011/09/P09030.

PG30

Desenvolvimento e caracterização de novas formas sólidas de insumos farmacêuticos ativos de ação antidepressiva

CARVALHO JUNIOR, P. S.¹; ELLENA, J.¹

paulo.sousa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O projeto de pesquisa, Desenvolvimento e Caracterização de Novas Formas Sólidas De Insumos Farmacêuticos Ativos de Ação Antidepressiva, tem o intuito de planejar e obter novas formas sólidas de Inibidores Seletivos de Recaptação de Serotonina (ISRS), com enfoque para Paroxetina, Fluoxetina e Sertralina. Para tal propósito, a presente proposta fez uso de síntese supramolecular baseada nas técnicas de engenharia de cristais moleculares (1), visando principalmente a obtenção de novos sais. Até o presente momento, Nitrato de paroxetina ((PRX+ $\times$ NO₃-) $\times$ H₂O)), Brometo de paroxetina Hemidratado ((PRX+ $\times$ Br-) $\times$ H₂O), Formas I e II para Nitrato de Fluoxetina (FLX+ $\times$ NO₃-) e Brometo de Sertralina (SRT+ $\times$ Br-) foram desenvolvidas e caracterizadas. Esta caracterização foi realizada usando técnicas de estado sólido tais como difração de raios-X em monocristal e pó, análises térmicas e solubilidade. O composto (PRX+ $\times$ NO₃-) $\times$ H₂O cristaliza em um grupo espacial C2 em que o arranjo cristalino é caracterizado pela formação de cadeias 1D entre PRX+ e NO₃- através de NH₂+ $\times$ $\times$ $\times$ O-. Neste empacotamento, moléculas de água são inseridas a rede reduzindo a repulsão de íons adjacente de mesma carga. O (PRX+ $\times$ Br-) $\times$ H₂O é isoestrutural com a (PRX+ $\times$ Cl-) $\times$ H₂O e apresenta canais ao longo de [010] onde se acomodam moléculas de água. Apesar a similaridade, a forma brometo exibe um comportamento térmico distinto com uma desidratação a 60-75°C não observada para a forma cloreto. A estabilidade e reversibilidade do processo foram relacionadas com aspectos estruturais. (1) A cristalização de uma solução racêmica do Nitrato de Fluoxetina resultou na formação de duas formas polimórficas: um falso conglomerado quiral e um racemato. O FLX+ $\times$ NO₃- forma I cristaliza num grupo espacial ortorrômbico Pca21, enquanto que a forma II que cristaliza na forma de um racemato no grupo espacial monoclinico centrossimetrico P21/c. Estes polimorfos estão monotropicamente relacionados e diferem-se a nível supramolecular. O composto SRT+ $\times$ Br- cristaliza no grupo espacial ortorrômbico P212121 e apresenta características conformacionais similares às reportadas para a sua forma cloreto. Estes estudos mostram que a flexibilidade conformacional da molécula de SRT propicia a diversidade de formas sólidas. Novos experimentos ainda estão sendo conduzidos visando a síntese supramolecular de novas formas sólidas que permitam estender as análises.

Palavras-chave: ISRS. Estrutura cristalina. Polimorfismo.

Referências:

1 BERNSTEIN, J. Polymorphism: a perspective. **Crystal Growth and Design**, v. 11, n. 3, p. 632-650, 2011.

PG31

Modeling hippocampal bursting using a lognormal recurrent network

CARVALHO, M. M.¹; FUKAI, T.²; MAIA, L. P.¹

milena.carvalho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Laboratory for Neural Circuit Theory - Brain Science Institute - RIKEN

In hippocampal CA1 and CA3 regions, various properties of neuronal activity follow skewed, lognormal-like distributions. Among them are average firing rates, rate and magnitude of spike bursts, magnitude of population synchrony, and correlations between pre- and postsynaptic spikes. (1) Lognormal patterns are also seen in other regions of the brain, but the origin of such patterns is still poorly understood. In recent studies, lognormal features of hippocampal activities were replicated with a multi-timescale adaptive threshold (MAT) neuron network with low-frequency spontaneous activity. (2) Furthermore, the bursting activity exhibited by this model resembles the complex spike bursts of hippocampal pyramidal neurons. We plan to (i) further explore the properties of this model and its spontaneous activity, both studying the consequences of excitatory and inhibitory plasticity and, in case of observing cascades of activity known as avalanches (as speculated), to (ii) perform a criticality analysis trying to find out if plasticity could act as a (self-)tuning mechanism into criticality in this network. (3)

Keywords: Computational neuroscience. Neuroplasticity. Neuronal avalanches.

Referências:

- 1 MIZUSEKI, K.; BUZSÁKI, G. Preconfigured, skewed distribution of firing rates in the hippocampus and entorhinal cortex. **Cell Reports**, v. 4, n. 5, p. 1010-1021, 2013. doi: 10.1016/j.celrep.2013.07.039.
- 2 OMURA, Y. et al. A lognormal recurrent network model for burst generation during hippocampal sharp waves. **The Journal of Neuroscience**. Submetido.
- 3 STEPP, N.; PLENZ, D.; SRINIVASA, N. Synaptic plasticity enables adaptive self-tuning critical networks. **PLoS Computational Biology**, v. 11, n. 1, p. e1004043-1-e1004043-28, 2015. doi: 10.1371/journal.pcbi.1004043.

PG32

The potassium system for producing a two-species Bose-Einstein Condensate ^{23}Na - ^{41}K with tunable interactions

CASTILHO, P. C. M.¹; PEÑAFIEL, E. P.¹; MERCADO-GUTIERREZ, E.¹; FARIAS, K. M.¹; BAGNATO, V. S.¹

patricia.cmcastilho@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The design and build up of the experimental system for producing the two-species Bose-Einstein Condensate (BEC), ^{23}Na - ^{41}K , with tunable interactions is a fundamental part of this phd Project. Many stages are needed in the way to the BEC and normally, the first step in every similar experiment is to trap and cool the atoms in a magneto-optical trap (MOT). In our experiment, for the potassium atoms, the double-MOT technique is used by loading a 2D-MOT (1) from the atomic vapor in a high vacuum chamber ($P 10^{-8}\text{Torr}$), transferring the pre-cooled atoms to a ultra-high vacuum chamber ($P 10^{-11}\text{Torr}$) and trapping them in a 3D-MOT. The potassium MOTs presents relatively high temperatures when compared with other alkaline metals such as rubidium and sodium. In addition, the molasses stage which can cool the atoms below the Doppler limit, does not work properly due to the small hyperfine energy splitting of the excited levels of the bosonic potassium D_2 line (^{39}K and ^{41}K). Recently a new kind of molasses, namely the *gray-molasses*, which uses resonant light with the transitions from the D_1 line is being used for ^{39}K cooling the atomic cloud up to $6\mu\text{K}$. (2) In this work we present in detail the potassium experimental system to generate the cold atomic cloud and the characterization of the *gray-molasses* for both bosonic potassium isotopes, ^{39}K and ^{41}K .

Keywords: Bose-Einstein Condensate. Trapped atoms. Laser cooling.

Referências:

1 CATANI, J. et al. Intense slow beams of bosonic isotopes. **Physical Review A**, v. 73, n. 3, p. 033415-1-033415-9, 2006.

2 SALOMON, G. et al. Gray-molasses cooling of ^{39}K to a high phase-space density. **Europhysics Letters**, v. 104, n. 6, p. 63002-p1-63002-p6, 2013.

PG33

Proteção de sistemas quânticos e o postulado da medida

CASTRO, L. A.¹; NAPOLITANO, R. J.¹

leonardo.castro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Medidas são imprescindíveis para a computação quântica, seja durante o processamento da informação ou para a obtenção do resultado final. Além disso, uma descrição realista de um computador quântico deve levar em conta sua interação com um ambiente externo, responsável por erros que removem o sistema de seu estado de evolução ideal. Neste trabalho, estudamos a dinâmica de uma medida quântica realizada continuamente sobre um sistema de qubits ao mesmo tempo que interage com um ambiente. Para isso, empregamos a descrição oferecida por uma equação mestra do tipo de Lindblad, que permite modelar o observador como markoviano, enquanto que o ambiente preserva sua memória. Este estudo da dinâmica de uma medida contínua ruidosa revela que o sistema preserva seu estado inicial com maior fidelidade quando é realizada uma medida incompatível com o ruído que recebe do ambiente. Estes resultados, já conhecidos para o caso mais simples de um ambiente inicialmente no estado de vácuo e com os estados do sistema degenerados (1), são generalizados para uma temperatura superior a zero e para um qubit sobre o qual opera uma porta lógica. (2) A universalidade desses fenômenos de preservação do estado inicial permite uma analogia com o Efeito Zenão Quântico. Mantendo o mesmo formalismo, mas adaptando o hamiltoniano de interação para descrever um decaimento, verificamos em que situações ocorrem efeitos Zenão e anti-Zenão quânticos, e comparamos os resultados com os já conhecidos para um modelo de medidas discretas. Uma adaptação da equação mestra, que fornece uma descrição mais realista ao tratar o observador como não-markoviano, também é testada.

Palavras-chave: Informação quântica. Medidas quânticas. Teoria de correção de erros.

Referências:

- 1 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. D. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, p. 022112-1-022112-16, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.022112.
- 2 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. D. J. Efficient finite-time measurements under thermal regimes. **European Physical Journal Plus**, v. 129, p. 206-1-206-24, 2014. doi: 10.1140/epjp/i2014-14206-0.

PG34

Peptídeo beta-amiloide estudado por Ressonância Magnética Nuclear de alta pressão

CAVINI, I. A.¹; KALBITZER, H. R.²; MUNTE, C. E.¹

italo.cavini@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universität Regensburg - Alemanha

O peptídeo beta-amiloide (Abeta) é o componente majoritário das placas amiloides encontradas no cérebro de pacientes com doença de Alzheimer e acredita-se que o seu acúmulo esteja relacionado à patogênese da doença. (1) Produto de clivagem da proteína precursora amiloide, o peptídeo Abeta apresenta em solução um intrincado equilíbrio entre estados monoméricos, oligoméricos (alguns deles tidos como as espécies tóxicas) e fibrilares, impossibilitando sua cristalização e posterior determinação de sua estrutura por difração de raios-X. A técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de alta pressão permite, por sua vez, a estabilização e detecção de estados conformacionais de mais alta energia, quase não populados a pressão ambiente. (2) Medidas de RMN do peptídeo Ab(1-40) em solução foram realizadas na Universidade de Regensburg, Alemanha utilizando espectrômetro Bruker de 800 MHz com criosonda acoplado a um sistema de aplicação de pressão. Séries de espectros 1H-15N-HSQC, 1H-13C-HSQC e 2D-HNCO foram adquiridas em pressões de 3 a 200 MPa, com intervalo de 20 MPa e em duas temperaturas distintas (277 e 288 K). Subtraindo-se os deslocamentos químicos de *random-coil* (3) dos deslocamentos químicos medidos para o peptídeo, é possível observar que o Ab(1-40) encontra-se parcialmente enovelado, até mesmo em altas pressões. As curvas de deslocamento químico com a pressão indicam ao menos três estados conformacionais monoméricos em equilíbrio. Considerando um modelo de troca rápida, o *fitting* global das curvas de deslocamento químico e volume dos picos fornecerá parâmetros termodinâmicos para as transições entre os conformeros considerados. A caracterização termodinâmica permitirá, ao fim do trabalho, o cálculo por RMN das estruturas tridimensionais individuais de cada um dos estados. Além de contribuir para o melhor entendimento das vias de agregação do peptídeo, tais estruturas potencialmente ajudarão no planejamento de moléculas que estabilizem uma ou mais de suas conformações, prevenindo a formação amiloide.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Doença de Alzheimer. Peptídeo beta-amiloide.

Referências:

- 1 HARDY, J.; SELKOE, D.J. The amyloid hypothesis of Alzheimer's disease: progress and problems on the road to therapeutics. **Science**, v. 297, n. 5580, p. 353-356, 2002. doi: 10.1126/science.1072994 .
- 2 MUNTE, C.E.; BECK-ERLACH, M.; KREMER, W.; KOEHLER, J.; KALBITZER, H.R. Distinct conformational states of the Alzheimer beta-amyloid peptide can be detected by high-pressure NMR spectroscopy. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 52, n. 34, p. 8943-8947, 2013. doi:

10.1002/anie.201301537.

3 KOEHLER, J.; BECK-ERLACH, M.; CRUSCA JR E., KREMER, W.; MUNTE, C.E.; KALBITZER, H.R. On the pressure dependence of ^{15}N chemical shifts in the model peptides Ac-Gly-Gly-X-Ala-NH₂. **Materials**, v. 5, n. 10, p. 1774-1786, 2012. doi: 10.3390/ma5101774.

PG35

Transição de fase quântica em um sistema 2D com rede de vórtices

CHAVIGURI, J. R. H.¹; CARACANHAS, M. A.¹; BAGNATO, V. S.¹

riuspssc@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nós estudamos um modelo consistente em um sistema 2D composto de duas espécies atômicas condensadas, uma delas possuindo uma rede de vórtices e a outra sendo diluída. (1) Em forma análoga ao tratamento feito para um superfluido em redes ópticas, vamos mapear o Hamiltoniano de nosso sistema no Hamiltoniano do modelo de Bose-Hubbard. O potencial periódico da rede advém da interação de campo médio entre as duas espécies, o qual é alterado com a variação do comprimento de espalhamento atômico, para induzir uma transição de fase quântica na espécie aprisionada nos vórtices. Para analisar estes fatos, nós tomamos em conta os seguintes regímenes (2): Mean field quantum Hall, menor banda de energia de Bloch, critério de imiscibilidade, critério de sistema 2D e lowest Landau level. O tratamento feito para o novo sistema consiste em analisar primeiro a rede estática, onde atingimos a diagrama de fases. Para o estudo da rede dinâmica empregaremos as transformações de Bogoliubov, os quais nos fornecerá um Hamiltoniano efetivo (3), com o qual nós esperamos conseguir uma nova diagrama de fases que contenha as vibrações (polarons ou modos de Tkachenko) devidas às transições quânticas. Finalmente, nós faremos simulações em Montecarlo para testar nossos resultados analíticos.

Palavras-chave: Mean field quantum hall. Lowest Landau level. Modos de Tkachenko.

Referências:

- 1 CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.; PEREIRA, R. G. Tkachenko polarons in vortex lattices. **Physical Review Letters**, v. 111, n. 11, p. 115304, 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.111.115304.
- 2 FETTER, A. L. . Rotating trapped Bose-Einstein condensates. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 2, p. 647-691, 2009. doi: 10.1103/RevModPhys.81.647.
- 3 BENJAMIN, D.; DEMLER, E. Variational polaron method for Bose-Einstein mixtures. **Physical Review A**, v. 89, n. 033615, p. 1-4, 2014. doi: 10.1103/PhysRevA.89.033615.

PG36

Estudos sobre relações de flutuações quânticas: definição de trabalho quântico e relações de novos observáveis

CHERUBIM, C. F.¹; BRITO, F.¹

cleverson.cherubim@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Avanços na fabricação e controle de sistemas em escalas micro e nanométricas têm proporcionado uma série de experimentos elaborados para explorar os conceitos da teoria quântica em um dos seus limites mais importantes: a dinâmica dissipativa de uma partícula quântica. No aspecto teórico, tais observações experimentais têm fomentado uma crescente atenção para estudos relacionando flutuações observadas em sistemas fora do equilíbrio com variações de grandezas termodinâmicas. Tais resultados têm sido denominados como Teoremas de Flutuações e têm na igualdade de Jarzynski (1) o seu maior paradigma, que relaciona através de uma igualdade o trabalho de processos fora do equilíbrio com a diferença de energia livre de Helmholtz. Neste trabalho estaremos interessados em entender o papel dos teoremas de flutuação na descrição da termodinâmica de sistemas quânticos e encontrar ou não novos observáveis para os quais teoremas de flutuação possam ser deduzidos. Tentaremos propor novos experimentos (2) visando verificar experimentalmente a igualdade de Jarzynski quântica (Já verificada experimentalmente). E por último, mas não menos importante, tentar descobrir se a definição atual de trabalho quântico (3) é a única possível de tal maneira a se obter teoremas de flutuação quântica.

Palavras-chave: Igualdade de Jarzynski. Teoremas de flutuação quântica. Processos fora do equilíbrio.

Referências:

- 1 JARZYNSKI, C. Equalities and inequalities: irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale. **Annual Review of Condensed Matter Physics**, v. 2, p. 329-351, 2011. doi: 10.1146/annurev-conmatphys-062910-140506.
- 2 LIPHARDT, J. et al. Equilibrium information from nonequilibrium measurements in an experimental test of Jarzynski's equality. **Science**, v. 296, n. 5574, p. 1832-1835, 2002. doi: 10.1126/science.1071152.
- 3 CAMPISI, M.; HANGGI, P.; TALKNER, P. Colloquium: quantum fluctuation relations: foundations and applications. **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 3, p. 771-791, 2011. doi: 10.1103/RevModPhys.83.771.

PG37

Septina de *Chlamydomonas reinhardtii*: estudos com foco em sua expressão e função

CIOL, H.¹; PINTO, A. A.²; ZERAIK, A. E.¹; MACEDO, J. N.¹; DEMARCO, R.¹; ARAUJO, A. P. U. de¹

heloisa.ciol@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Física - UFSCar

Septinas pertencem a uma família de proteínas que ligam o nucleotídeo guanina e formam filamentos altamente organizados. (1) Foram primeiramente descritas em leveduras como proteínas essenciais para a finalização do ciclo celular, mas em outros organismos sua ação e função ainda não são totalmente esclarecidas. Entender o papel da septina em um organismo eucarioto ancestral, como *Chlamydomonas reinhardtii*, pode ajudar a elucidar as funções primordiais dessa proteína. Dessa forma, utilizamos a septina de *C. reinhardtii* (Crsept) como isca em ensaios de duplo-híbrido em leveduras e obtivemos como possíveis parceiras de interação as proteínas S-Adenosyl-Homocysteine-Hydrolase (SAHH) e Subtilase-like Serino Protease (Esporangina). Também foram feitos ensaios de imunolocalização por fluorescência in situ da Crsept em algas fixadas, mostrando que a proteína se encontra primordialmente na base flagelar durante as fases G0 e G1 do ciclo celular, e na membrana das células filhas durante a fase de mitose. Por fim, utilizamos a técnica de micro-RNA artificial de interferência (2) para silenciar o gene *Crsept* e observamos que algumas células apresentavam um fenótipo incomum, em forma de bastão, durante a mitose. As proteínas SAHH e esporangina resgatadas por duplo-híbrido já foram descritas no proteoma flagelar (3), o que combinado com a localização da septina em *Chlamydomonas*, reforça a hipótese de que a Crsept tenha função relacionada à organização e/ou estrutura flagelar nas fases de G0 e G1, além de participar do processo de divisão celular.

Palavras-chave: Septina. Flagelo. *Chlamydomonas*.

Referências:

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

2 MOLNAR, A. et al.. Highly specific gene silencing by artificial microRNAs in the unicellular alga *Chlamydomonas reinhardtii*. **The Plant Journal**, v. 58, n. 1, p. 165-174, 2009. doi: 10.1111/j.1365-313X.2008.03767.x.

3 DIENER, D.R.; LUPETTI, P.; ROSENBAUM, J.L. Proteomic analysis of isolated ciliary transition zones reveals the presence of ESCRT proteins. **Current Biology**, v. 25, n. 3, p. 379-384, 2015. doi: 10.1016/j.cub.2014.11.066..

PG38

Caracterização espectroscópica da dinâmica populacional de moléculas de Ftalocianina de Zinco (ZnPc)

COCCA, L. H. Z.¹; DE BONI, L.¹

leandro.cocca@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho, é apresentada uma caracterização espectroscópica da dinâmica populacional de três moléculas de Ftalocianina de Zinco (ZnPc), cada uma contendo variações dos grupos laterais em suas estruturas periféricas, que por sua vez, podem alterar os processos fotofísicos e fotoquímicos destas, modificando assim, a sua dinâmica populacional dos níveis eletrônicos. Com a utilização de técnicas que envolvem conceitos de espectroscopia de absorção, óptica linear e de óptica não-linear, tais como Varredura-Z por pulso único (1-2) e uma variação desta, a Varredura-Z por trem de pulsos (2-3), determinou-se os parâmetros que caracterizam a dinâmica das populações dos estados excitados destas moléculas, bem como seções de choque de absorção dos estados fundamental, primeiros excitados, tanto para o singlete como para o tripleto. Além disso, determinou-se os tempos de decaimento radiativo, tempos de cruzamento intersistemas (singlete para tripleto), tempos de conversão interna e por fim, analisou-se as eficiências quânticas de fluorescência, (que avalia o quão significativo é o decaimento populacional do primeiro estado singlete excitado para o estado fundamental via emissão radiativa), a eficiência quântica de conversão interna e por fim analisou-se a eficiência quântica de tripletização (que determina o quão hapt a molécula está para sofrer uma mudança entre sistemas, singlete e tripleto). Para uma maior compreensão das equações de taxa que governam tal dinâmica populacional das ZnPc, foram utilizados um diagrama de Jablonski de cinco níveis de energia para descrever as transições eletrônicas e relaxações dos estados singletos e dois níveis de energia que descrevem as taxas de absorção e relaxação nos estados tripletos, tais equações de taxa foram resolvidas numericamente e correlacionadas com os dados experimentais afim de determinar os parâmetros espectroscópicos destas amostras.

Palavras-chave: Ftalocianina de zinco. Espectroscopia . Varredura-Z.

Referências:

- 1 SHEIK-BAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, 1990.
- 2 DE BONI, L. et al. Resonant nonlinear absorption in Zn-phthalocyanines. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 112, n. 30, p. 6803-6807, 2008.
- 3 MISOGUTI, L.; MENDONÇA, C. R.; ZILIO, S. C. Characterization of dynamic optical nonlinearities with pulse trains. **Applied Physics Letters**, v. 74, n. 11, p. 1531-1533, 1999.

PG39

Remote shimming coil controller over HTTP

COELHO, F. B.¹; DIAS, D. M.¹; PIZETTA, D. C.¹; VIDOTO, E. L. G.¹; MARTINS, M. J.¹; TANNUS, A.¹

felipe.coelho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The quality of magnetic resonance experiments is highly dependent on the homogeneity of the main magnetic field. (1) For imaging systems, an homogeneity less than 5 parts per million (ppm) is desired, and for spectroscopy, less than 1 ppm. Such homogeneity is hard to achieve with the main magnet only, requiring extra equipment to be able to lower it. Active shimming coils are one possibility, and the one covered by this work. A remote controller built with a Raspberry Pi as a server acts as the interface for the shimming coils. The controller can be placed as close to the equipment as viable, reducing latency during current changes in the shimming coils, as well as being able to closely monitor the coils' health. HTTP is used to allow the controller to be connected to any regular computer network through, for example, shielded Ethernet cables, and be easily accessible by clients such as the ToRM Console. The Raspberry Pi interfaces with 16 bit DACs and ADCs using the SPI protocol, which in turn are connected to amplifiers and the shimming coils. Aside from the regular HTTP interface, the controller will also have a secondary SPI interface to be used directly by the spectrometer. This interface will allow the spectrometer to establish a different set of shimming coil currents per slice in a imaging experiment, resulting in more detailed images in a multi-slice experiment. A prototype has been built using the OrCAD suite (2) to control 8 channels, being able to set the current in each channel and also read it back. Care has been taken in the current design to properly ground the mixed-signal Integrated Circuits (ICs) used in the prototype (3) in order to reduce unwanted voltage offsets. The controller outputs are currently able to generate voltages with less than 0.1% full scale error, and a 0.05% error is targeted in a future design. It is currently able to set the current for a single channel in under 4 μ s and less than 50 μ s for all 8 channels. Reading the coils' currents has not been timed extensively, but it is currently possible to read all 8 channels in under 100 μ s. So far the controller has been able to handle continuous testing during several hours without issues. The output precision is still to be increased in a new board layout, but has been enough to assert that all systems are working tightly together. In the upcoming months, the focus will shift to integration with other software developed by the group, especially the ToRM Console, which will be the main client for the shimming controller.

Keywords: Magnetic Resonance. Shimming. HTTP.

Referências:

1 CALLAGHAN, P.;. **Principles of nuclear magnetic resonance microscopy**. Oxford: Clarendon Press, 1993. 492 p.

2 MITZNER, K.;. **Complete PCB design using OrCAD capture and PCB editor**. Newton, MA,



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

USA: Newnes, 2009. 471 p.

3 FORTUNATO, M.. **Successful PCB grounding with mixed-signal chips: follow the path of least impedance.** Disponível em: <<http://www.maximintegrated.com/en/app-notes/index.mvp/id/5450>>. Acesso em: 15 de junho 2015..

PG40

Síntese e caracterização dos compostos $\text{Sr}_{1-x}\text{Cu}_x\text{TiO}_3$ e $\text{SrTi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ aplicados a catálise da reação de deslocamento gás-água

COLETTA, V. C.¹; MARCOS, F. C. F.²; NOGUEIRA, F. G. E.²; BERNARDI, M. I. B.¹; MICHALOWICZ, A.³; GONÇALVES, R. V.¹; ASSAF, E. M.²; MASTELARO, V. R.¹

vitor.coletta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

³Universite Paris-Est Creteil Val de Marne ICMPE-CNRS - França

A reação de deslocamento gás-água é realizada na produção de H_2 livre de CO, necessário em aplicações como o abastecimento de células de combustível do tipo membrana de transferência de prótons (PEM). (1) Óxidos de estrutura perovskita contendo cobre são promissores para a catálise deste tipo de reação por apresentar uma boa estabilidade química. (2) Este projeto de tese tem como objetivo realizar a síntese e a caracterização de nanopartículas de composição $\text{Sr}_{1-x}\text{Cu}_x\text{TiO}_3$ e $\text{SrTi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ visando sua aplicação como catalisadores para a reação de deslocamento gás-água. A síntese foi realizada pelo método dos precursores poliméricos com calcinação em atmosfera de N_2 seguida por um tratamento em O_2 para remoção de carbono, possibilitando a obtenção de nanopartículas de grande área superficial em comparação a outros métodos. (3) Os resultados de difração de raios-X mostraram que os átomos de cobre são segregados da fase perovskita para x a partir de 0,06 na forma da fase CuO. De acordo com medidas de temperatura programada (TPR), o processo de redução para cobre metálico ocorre a 250°C , resultado confirmado por experimentos in-situ de difração e de absorção de raios-X. Estes experimentos também mostraram que a redução é alcançada a temperaturas menores se o cobre substitui os sítios do titânio, o que contribui para uma melhor atividade catalítica. A composição $\text{SrTi}_{0,80}\text{Cu}_{0,20}\text{O}_3$ apresentou a melhor atividade com 74% de conversão de CO a 350°C . Na continuidade do projeto, foi realizada a síntese de amostras contendo Cu e Ni pelo método de impregnação. Estas amostras serão agora caracterizadas em termos de suas propriedades estruturais e catalíticas.

Palavras-chave: Catálise. Perovskitas. Hidrogênio.

Referências:

1 RATNASAMY, C.; WAGNER, J. P. Water-gas shift catalysis. **Catalysis Reviews**, v. 51, n. 3, p. 325-440, 2009. doi: 10.1080/01614940903048661.

2 MALUF, S. S. et al. Study of $\text{La}_{2-x}\text{Ca}_x\text{CuO}_4$ perovskites for the low temperature water gas shift reaction. **Applied Catalysis A**, v. 413-414, p. 85-93, 2012. doi: 10.1016/j.apcata.2011.10.047.

3 DA SILVA, L. F. et al. An improved method for preparation of SrTiO_3 nanoparticles. **Materials Chemistry and Physics**, v. 125, n. 1-2, p. 168-173, 2011. doi: 10.1016/j.matchemphys.2010.09.001.

PG41

Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares

COMIN, C. H.¹; COSTA, L. da F.¹

chcomin@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma das dinâmicas mais estudadas na área de redes complexas é a de passeio aleatório tradicional. (1) Nessa dinâmica, o agente possui probabilidade de transição equiprovável de um nó para cada um de seus vizinhos. Provavelmente a propriedade mais conhecida de tal dinâmica é que sua probabilidade estacionária é completamente determinada pelo grau de cada nó da rede. Para redes direcionadas essa propriedade não é mais válida, e pelo fato de ser um problema de difícil tratamento analítico, existem poucos estudos sobre o tema. (2-3) Neste trabalho, em grande parte experimental, atacamos uma versão simplificada do problema, na qual existem comunidades bem definidas na rede. Tais comunidades representam um conjunto de eficiência diferenciada na rede, isto é, nós de uma dada comunidade possuem uma capacidade similar de gerar atividade a partir do grau de entrada de cada nó. Tal propriedade é apenas um exemplo de um conceito mais geral que pode ocorrer em qualquer dinâmica de rede. Esse conceito envolve a discriminação dos nós da rede em diferentes grupos ao considerarmos suas propriedades topológicas e dinâmicas simultaneamente, sendo que essa discriminação não ocorre ao analisarmos a topologia ou dinâmica separadamente.

Palavras-chave: Redes complexas. Passeio aleatório. Redes direcionadas.

Referências:

- 1 LOVÁSZ, L. Random walks on graphs: a survey. **Combinatorics**, v. 2, p. 1-46, 1993.
- 2 FORTUNATO, S. et al. Approximating Pagerank from in-degree. In: AIELLO, W. et al (Ed). **Algorithms and models for the Web-Graph**. Berlin: Springer, 2008. Lecture Notes in Computer Science, v.4936. p.
- 3 ZIA, R. K. P.; SCHMITTMANN, B.. Probability currents as principal characteristics in the statistical mechanics of non-equilibrium steady states. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2007, p. P07012, 2007. doi: 10.1088/1742-5468/2007/07/P07012.

PG42

Implementation of parallel imaging using phased array and sample arrayed coils

CONSALTER, D.¹; PAPOTI, D.¹; VIDOTO, E.¹; TANNUS, A.¹

dmconsalter@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Parallel techniques and dedicated hardware has been developed since the 1980s as a way to reduce acquisition time on Magnetic Resonance Imaging (MRI) scanners. A phased array is a receiver only mode device concept, which uses multiple coils (channels) with their own detection circuits to simultaneously acquire MRI or localized spectroscopic signals. An example of parallel imaging technique that use phased array coils is Sensitivity Encoding (SENSE).⁽¹⁾ Sample arrayed is the name proposed in this work for a method in which each channel of a multichannel coil is responsible to acquire independently the signal from its sample so that each sample signal is addressed to its specific channel. In this work, we describe the development of a four-channel phased array coil ⁽²⁾ for rat head anatomy using flexible printed circuit board (PCB), to operate on a 2T pre-clinical MRI scanner as a way to validate the construction method and usage of flexible PCB as a receiver coil. We also developed a four-channel sample array coil to simultaneously perform the imaging of four seeds at the same scan, as a way to validate the proposed method to improve image quality at the same time that accelerating multiple seed imaging for agriculture studies. Despite of the lower quality factor (Q) of the phased array PCB coil as compared to a regular wire winding coil, the final signal-to-noise ratio (SNR) is expected to be good enough to compensate for the loss caused by the lower Q as the geometry of the coil is more adequate to the anatomy, and then, has more proximity to the sampled volume since the coil is flexible. In addition, the coil manufacturing process is facilitated since the entire coil is constructed as a PCB prototype. The firsts results for the sample array imaging shows that the method is promising since the array, coil geometry, field of view and matrix acquisition of the sequence is chosen adequately

Keywords: MRI. MRI COILS. NMR.

Referências:

- 1 PRUESSMANN, K. et al. SENSE: sensitivity encoding for fast MRI. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 42, n. 5, p. 952 - 962, 1999.
- 2 OHLIGER, M. A.; SODICKSON, D. K. . An introduction to coil array design for parallel MRI. **NMR in Biomedicine**, v. 19, n. 3, p. 300 - 315, 2006.

PG43

Detection of tumor cells using folic acid modified extended gate field-effect transistors

CORREIA, A. R.¹; VIEIRA, N. C. S.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

abilenerc@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Folate receptors (FRs) are glycoproteins that bind folic acid (or folate) with high affinity ($K_d = 0.1$ to 10 nM). (1) They are used as targets for the detection and diagnosis of cancer since they are over-expressed on the surface of cancer cells. (1) Classical assays as fluorescent imaging and radiolabeled are effective methods used to tracking tumor cells, but they are costly, time-consuming and require highly qualified personnel. On the other hand, biosensors are promising for distinguish between healthy and tumor cells in a simple and inexpensive way by immobilizing a suitable receptors able to recognize FRs proteins. (2) The main goal of this project is to develop biosensors for the detection of tumor cells based on separative extended gate field-effect transistor (SEGFET) platforms modified with folic acid. (3) The project will be developed in the Nanomedicine and Toxicology Group (GNANO/IFSC/USP) in partnership with physicians/researchers from Hemotherapy Center of Ribeirão Preto (USP). The advantages of SEGFET-based biosensors, compared to others biosensors types (electrochemical, optical, piezoelectric), is the combination of high sensitivity and label-free detection and, most importantly, the possibility of large-scale production using microfabrication technology. However, a general limitation in all field-effect biosensors is that only the charge changes due to receptor-target interactions that occur within the Debye length from the active solid-liquid interface can be measured due to screening of inorganic counter ions of the electrolyte on the immobilized receptors. In this project, folate will be used as receptor instead of antibodies to binding to FRs because they are a small-sized and inexpensive molecule having the advantages: (1) overcoming the screening limitations of Debye length and (2) improve the lifetime and reproducibility of the SEGFET because it is more stable and do not suffer inactivity as often happens with antibodies. We believe that the idea of field effect devices combined with high affinity between folic acid-FRs is promising for making a biosensor capable of providing a rapid and accurate identification of tumor cells efficiently.

Keywords: Folic acid . Circulating tumour cells. SEGFET-based biosensors.

Referências:

- 1 CHEN, C. et al. Structural basis for molecular recognition of folic acid by folate receptors. **Nature**, v. 500, n. 7463, p. 486-489, 2013. doi: 10.1038/nature12327 .
- 2 COSTA, C. et al.. Biosensors for the detection of circulating tumour cells. **Sensors**, v. 14, n. 3, p. 4856-4875, 2014. doi: 10.3390/s140304856.
- 3 VIEIRA, N.C.S. et al. Label-free electrical recognition of a dengue virus protein using the SEGFET



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

simplified measurement system. **Analytical Methods**, v. 6, n. 22, p. 8882-8885, 2014. doi: 10.1039/c4ay01803f.

PG44

Non-Markovian quantum dynamics

COSTA FILHO, J. I.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

jose.inacio.filho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

One important aspect in the study of open quantum systems (1) is the concept of non-Markovianity, which arises due to memory effects of the environment. Non-Markovianity is related to revivals of memory, thus enabling the system to recover part of the lost information back from the environment. As quantum technologies rely on the ability to coherently manipulate, process and transfer information encoded in quantum states, non-Markovian processes arise as important subjects of study, with applications that are manifold. In this work we study quantum non-Markovianity with regard to its characterization, quantification and detection (2), as well as its use as a resource for implementation of quantum protocols. With respect to the characterization, after a comparison with its classical stochastic definition, we use as a criterion for non-Markovianity the non-divisibility of the dynamical maps, which is shown to be more embracing than the other known criteria. Considering quantification and detection, we use a plethora of measures and witnesses, respectively, related to geometric, informational and thermodynamic aspects of the system. Finally, we expect to answer the questions related to its use as a resource with the development of a Quantum Resource Theory of non-Markovian processes. (3)

Keywords: Quantum information theory. Non-Markovianity. Quantum resource theories.

Referências:

1 RIVAS, Á.; HUELGA, S. F. **Open quantum systems**: an introduction. Berlin: Springer, 2012. 97 p.

2 RIVAS, Á.; HUELGA, S. F.; PLENIO, M. B. Quantum non-Markovianity: characterization, quantification and detection. **Reports on Progress in Physics**, v. 77, n. 9, p. 094001, 2014. doi: 10.1088/0034-4885/77/9/094001.

3 BRANDÃO, F. G. S. L.; GOUR, G. Reversible framework for quantum resource theories. **Physical Review Letters**, v. 115, n. 7, p. 070503, 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.115.070503.

PG45

Fusing Majorana modes within a quantum dot

CRUS, A. R.¹; PENTEADO, P. H.¹; VERNEK, E.²; EGUES, J.C.¹

adonai@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Física - UFU

In this work we investigate signatures of Majorana bound states through quantum transport in nanostructures composed of a quantum dot connected to source and drain leads and side coupled to *two* topological superconducting nanowires sustaining Majorana end modes. Modeling the nanowire via a Kitaev chain, we have recently used a recursive Green's-function approach to calculate the conductance and local density of states (LDOS) of a dot side coupled to a single wire. (1) As described in Ref. (1), the LDOS clearly shows a leakage of the Majorana end mode from the wire into the dot, where it emerges as a unique dot level pinned to the Fermi energy of the leads (ε_f). The calculated two-terminal conductance through the dot displays an unambiguous signature of the Majorana bound states, i. e., a pinned resonance occurring even when the dot level is far above ε_f . Interestingly, this Majorana signature in the dot remains even in the presence of interactions. (2) Motivated by these earlier results in our group, we now consider a quantum dot side coupled to *two* topological superconducting nanowires. More specifically, we consider a cross geometry in which the dot is attached to a source and drain leads (longitudinal direction) while being connected to two Kitaev chains that meet at the dot position (middle of the cross). This geometry is particularly interesting to investigate the fusion of Majorana end modes into ordinary fermionic modes within the dot. By tuning the superconducting phase difference between the wires and the quantum-dot gate voltage, we are able to control the emergence and splitting of Majorana modes. This work is funded by FAPESP, FAPEMIG, CNPq, CAPES, PRP-USP Q-NANO.

Keywords: Majorana fermions. Kitaev chain. Topological superconductors.

Referências:

1 VERNEK, E.; PENTEADO, P. H.; SERIDONIO, A. C.; EGUES, J. C. Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. **Physical Review B**, v. 89, n. 16, p. 165314-1-165314-5, 2014. doi: 10.1103/PhysRevB.89.165314.

2 RUIZ-TIJERINA, D. A. ; VERNEK, E.; DIAS DA SILVA, L. G. G. V.; EGUES, J. C. Interaction effects on a Majorana zero mode leaking into a quantum dot. **Physical Review B**, v. 91, n. 11, p. 115435-1-115435-17, 2015. doi: 10.1103/PhysRevB.91.115435.

PG46

Evolution of microstructure and molecular dynamics of Poly(3-ethylhexylthiophene) probed by Nuclear Magnetic Resonance

CUNHA, G. P.¹; AZÊVEDO, E. R.¹; DUONG, D. T.²; FARIA, G. C.¹

giovanni_p@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Chemistry Department - Stanford University

Conjugated polymers have been extensively studied on the last years due to their application as active layer in organic devices, such as OFETs and OLEDs. What give these polymers interesting mechanical, electrical and optical properties is their rich microstructure and molecular dynamics. (1) However, many of these aspects are not fully understood. Solid-state nuclear magnetic resonance (ssNMR) is a powerful tool to shed light into these questions. The locality and orientation dependence of the spin interactions make ssNMR sensitive to the packing and conformation of chains in crystalline and amorphous domains and also to segmental molecular motions.(2) With this in mind, high field ssNMR spectroscopy and low-field time domain NMR (TDNMR) were employed to probe the microstructure and chain dynamics of an important conjugated polymer: poly(3-ethylhexylthiophene) (P3EHT). Both T1 and DIPSHIFT measurements show that at room temperature the side chains of the P3EHT are throughout mobile, even in the crystalline region, showing the usual head to tail mobility gradient as found in many branched polymers. The temperature dependence of the motion processes was probed using dipolar filtered TD-NMR methods, which allowed determining the onset temperature of side chain and main chain motions. P3EHT shows unusually long crystallization time, which allowed following the crystallization process, after melt annealing and fast cooling to room temperature, in situ by tracking changes in the ¹³C-CPMAS spectra and in the intensity of dipolar filtered FIDs at low field. While high field ¹³C-CPMAS give the behavior of specific carbons, showing specific changes in the main chain conformation during the crystallization, low-field TDNMR probes the bulk material, but the changes can be followed closely in time.

Keywords: Conjugated polymers. Microstructure. Molecular dynamics.

Referências:

- 1 SALLEO, A. et al. A general relationship between disorder, aggregation and charge transport in conjugated polymers. **Nature Materials**, v. 12, p. 1038-1044, 2013. doi: 10.1038/nmat3722.
- 2 PASCUIT, O. F. et al.. High crystallinity and nature of crystal-crystal phase transformations in regioregular Poly(3-hexylthiophene). **Macromolecules**, v. 43, n. 22, p. 9401-9410, 2010. doi: 10.1021/ma102205t.

PG47

Obtenção de estrutura cristalográfica por difração de raio-X do regulador transcricional de *Enterococcus faecalis* ElrR.

DE GROOTE, M. C. R.¹; CAMARGO, I.¹; REPOILA, F.²; SERROR, P.²; HORJALES, E.¹

mdegroote@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto Francês de Pesquisa Agronômica - INRA

ElrR é um regulador transcricional pertencente à família Rgg like (1,2), regulado por *quorum sensor*, que ativa a expressão do operon *elr* de virulência (3) de *Enterococcus faecalis*. Desenvolvemos expressão, purificação e determinação da estrutura cristalográfica de ElrR heteróloga expressa em *E. coli* BL21 (DE3). Observamos que ElrR é um dímero em solução e que cristaliza em duas formas geométricas correspondendo aos grupos espaciais P1 e P43212, com difração de 2.15 Å e 2.13 Å de resolução respectivamente. A determinação da estrutura foi realizada por difração anômala simples (SAD) do cristal P1 com 2.55 Å de resolução, seguido por substituição molecular nos dados coletados de cristais P1 e P43212 de maior resolução, utilizando como modelo a estrutura inicial obtida por SAD. Ambas estruturas são bastante similares, havendo pequenos deslocamentos de algumas hélices do sítio alostérico e do domínio HTH, de ligação ao ADN. Essas alterações da estrutura da ElrR são causadas pelos contatos cristalográficos, uma vez que não existem outros motivos na estrutura obtida que explique as alterações observadas.

Palavras-chave: Reguladores transcpcionais. Família Rgg. *E. faecalis*.

Referências:

- 1 BRINSTER, S. et al. Enterococcal leucine-rich repeat-containing protein involved in virulence and host inflammatory response. **Infection and Immunity**, v. 75, n. 9, p. 4463-4471, 2007.
- 2 DUMOULIN, R. et al. Enterococcal Rgg-like regulator ElrR activates expression of the *elrA* operon. **Journal of Bacteriology**, v. 195, n. 13, p. 3073-3083, 2013.
- 3 MASHBURN-WARREN, L.; MORRISON, D. A.; FEDERLE, M. J. A novel double-tryptophan peptide pheromone controls competence in *Streptococcus* spp. via an Rgg regulator. **Molecular Microbiology**, v. 78, n. 3, p. 589-606, 2010. doi: 10.1111/j.1365-2958.2010.07361.x.

PG48

Engenharia de interações para obtenção de estados não-clássicos

DE MORAES NETO, G. D.¹; TEIZEN, V. F.²

gdmneto@gmail.com

¹University College London

²Instituto de Física de São Carlos - USP

A geração, proteção e estabilização de estados quânticos é muito importante para a mecânica quântica, afinal é essencial tanto para a computação como para simulações quânticas - talvez futuramente revelando o que faz a computação quântica ter suas características e poder. Dentre as estratégias possíveis para gerar estados quânticos existe a chamada engenharia de interações quânticas, na qual pode-se tanto estudar-se como alterar a maneira a partir da qual sistemas interagem entre si para produzir um determinado estado estacionário desejado quanto para investigar meramente propriedades dos estados gerados ao se alterar alguma característica de tal interação. Dentre os vários aspectos interessantes apresentados por estados não-clássicos destacam-se emaranhamento (1,2), discórdia, compressão (3) e superposição, ora por serem tidas como necessárias para computação quântica, ora por prescindirem de correlações não-clássicas, ora por necessitarem de interações ou processos de caráter coletivo. Neste trabalho vamos apresentar uma proposta a partir da qual gerar o primeiro estado excitado de Fock $|1\rangle$ e uma proposta de engenharia de reservatórios em sistemas de spins na qual podemos obter estados quânticos W com fidelidade satisfatória. Além disso pretendemos estudar como gerar outros estados como os estados comprimidos atômicos, e, futuramente, realizar uma possível engenharia com o objetivo de gerar estados que apresentem discórdia.

Palavras-chave: Estados atômicos coerentes. Geração e proteção de estados. Estados emaranhados.

Referências:

1 REITER, F. et al. Steady state entanglement of two superconducting qubits engineered by dissipation. **Physical Review A**, v. 88, n. 3, p. 032317-1-032317-11, 2013.

2 DE MORAES NETO, G. D. et al. Steady entanglement in bosonic dissipative networks. **Physical Review A**, v. 90, n. 6, p. 062322-1-062322-6, 2014.

3 KITAGAWA, M.; UEDA, M. Squeezed spin states. **Physical Review A**, v. 47, n. 6, p. 5138-5143, 1993.

PG49

Study of two photon absorption of organic compounds through the Z-Scan technique

DIPOLD, J.¹; MELO, R.²; FONSECA, R. D.¹; SIMAS, A. M.²; DE BONI, L.¹; MENDONÇA, C. R.¹

jessica.dipold@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de Pernambuco - UFPE

Since the development of femtosecond laser pulses, the study of nonlinear optical processes have received a great deal of attention in several topics, from harmonic generation to multi-photon absorption. Two-photon absorption has been used in microfabrication by photopolymerization, fluorescence microscopy, optical limiting devices, among other important phenomena. In this perspective, the production of novel materials with high optical nonlinearities is fundamental to the development of photonics and its applications. Organic compounds are promising materials in both structure and electronic levels, and are often used in nonlinear studies. Here, we study the two-photon absorption process of six different conjugates organic compounds, obtained through cooperation with the Universidade Federal de Pernambuco (UFPE). The two photons absorption spectrum of these molecules were obtained through the open aperture Z-Scan technique (1), using femtoseconds pulses from an optical parametric amplifier which is pumped by a femtosecond pulse from a Ti:Sapphire laser. We aim to obtain the two photon absorption cross-section spectrum and compare it with the theoretical prediction, to establish a relationship between molecular structure and optical nonlinearities.

Keywords: Two photon absorption. Z-scan. Organic molecules.

Referências:

1 SHEIK-BAHAE, M.; SAID, A. A.; WEI, T. H.; HAGAN, D. J.; VAN STRYLAND, E. W.. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, 1990.

PG50

Sensores ópticos baseados na reflexão interna

DOMENEGUETI, J. F. M.¹; OLIVEIRA, A. R.¹; ZÍLIO, S. C.¹

jose.domenegueti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As propriedades ópticas de uma substância estão relacionadas com o seu índice de refração (IR), o que torna esta uma grandeza de fundamental importância na caracterização de materiais. Apesar da crescente demanda por maneiras mais eficientes de se determinar o IR, as técnicas mais precisas atualmente são muito complexas e em geral dependem de um aparato sofisticado, o que motiva o desenvolvimento de técnicas mais simples precisas e robustas para a determinação do IR. Neste trabalho empregamos uma técnica inovadora, proposta por Zilio (1), com o objetivo de desenvolver sensores ópticos de umidade relativa e de afinidade química. Nessa técnica, exploramos a diferença de fase adquirida pelas componentes de polarização (s) e (p) do campo elétrico de um feixe laser, quando refletido em uma interface entre um prisma e a amostra de interesse, para gerar um padrão de interferência que apresenta um mínimo de intensidade luminosa numa posição correspondente ao ângulo crítico da reflexão interna. Variações nas propriedades macroscópicas da amostra se apresentam como deslocamentos na posição do mínimo de intensidade, o que permite que este seja monitorado e correlacionado, em particular, com a umidade ou a concentração de analitos em uma solução. Nas medidas realizadas até o momento obtivemos sensibilidade superior a 10^{-4} em unidades de IR, o que acreditamos ser uma boa precisão, mas ainda possível de ser aprimorada. Para esse fim, métodos de deposição de filmes finos e sistemas de compensação de flutuações térmicas estão sendo estudados. Os resultados preliminares (2) são promissores e mostram que a técnica pode ser empregada, com vantagens, no desenvolvimento de sensores de umidade relativa e afinidade química.

Palavras-chave: Sensores ópticos. Refratometria. Ângulo crítico.

Referências:

1 ZÍLIO, S. C. A simple method to measure critical angles for high-sensitivity differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.

2 DOMENEGUETI, J. F. M.; ZÍLIO, S. C. Humidity and pressure sensor based on internal reflection. **Applied Optics**, v. 53, n. 8, p. 1591-1596, 2014.

PG51

Comparative analysis of bones with complex networks

DORO NETO, C.¹; FONTOURA COSTA, L. da¹

carlos.doro.neto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Bones are essential for the protection of internal organs, for body structure, and for mechanical support in vertebrates, and present a complex network of channels (Havers and Volkmann channels) required to nourish tissue cells. However, the lack of quantitative studies leads to scarce parameters and measures to characterize these structures. By using computational graphic, image processing, and complex networks we will describe the acquisition, reconstruction, representation, and analysis of these channel networks. Two distal phalanges (one from a hen and one from a rooster) were submitted to histological section processing; the resulting slices were photographed and the images were treated before 3D reconstruction. The volumes were converted into complex networks which allow us to use methods of analysis widely accepted in literature. Networks were compared with each other and with the network obtained in the study by Viana et al. (1-3) using degree analysis, node positioning, community detection, and random and systematic attacks. Three results stand out: (i) the networks show a predominantly dichotomic division of channels; (ii) the networks show high modularity, indicating that specific areas perform specific functions; and (iii) the networks are particularly resistant to cascade attacks.

Keywords: Image processing. Complex network. Bones.

Referências:

- 1 VIANA, M. P. et al.. Modularity and robustness of bone networks. **Molecular BioSystems**, v. 5, n. 3, p. 255, 2009. doi: 10.1039/B814188F.
- 2 VIANA, M. P. et al.. Complex channel networks of bone structure. **Applied Physics Letters**, v. 88, n. 3, p. 033903, 2006. doi: 10.1063/1.2166473.
- 3 VIANA, M. P.. **Metodologia das redes complexas para caracterizacao do sistema de Havers**. 2007. 109p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

PG52

Residue coevolution and protein folding predictions

DOS SANTOS, R. N.¹; MORCOS, F.²; JANA, B.²; ANDRICOPULO, A. D.¹; ONUCHIC, J. N.²

rnsantos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Rice University

Direct-coupling Analysis (DCA) is a computational method that enables the prediction of contacts between protein residues using only available amino acid sequences related to a target protein. (1) It is based on the hypothesis that mutations in residues that participate in specific interactions must be compensated by other mutations to preserve protein structure and functionality. A quantitative analysis of the direct correlations between residue pairs in a sequence alignment can provide interactions that are essential for protein function and gives fundamental clues to identify possible conformational states in a protein. One of the limitations in estimating residue couplings is the noise generated by the use of incomplete sequences with long mismatching (gap) regions. Utilizing these type of sequences in an alignment could lead to erroneous classification of these regions as being highly correlated and could mix them with true interactions. In this work, we describe the effect of using different sequence compositions and how to substantially improve the prediction of directly coupled residues. We provide evidence on how this filtering approach leads to better predicted contact maps in comparison to native ones. Moreover, we show how this methodology can be used in association with molecular modeling methods, such as structure-based molecular dynamics, to predict the folding of proteins.

Keywords: Protein folding. Coevolution. DCA.

Referências:

1 MORCOS, F.; PAGNANI, A.; LUNT, B.; BERTOLINO, A.; MARKS, D. S.; SANDER, C.; ZECCHINA, R.; ONUCHIC, J. N.; HWAA, T.; WEIGT, M. Direct-coupling analysis of residue coevolution captures native contacts across many protein families. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 108, n. 49, p. E1293-E1301, 2011. doi: 10.1073/pnas.1111471108.

PG53

Lieb-Robinson bounds and superradiance in ultracold atomic clouds

ESPIRITO SANTO, T. S.¹; BACHELARD, R. P. M.¹

tiagosantiago@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The objective of this project is to investigate the light propagation and the quantum correlations it induces in ultracold atomic clouds. Cold atoms exhibit the property of cooperatively scattering the radiation: even a single photon can be shared by the atoms - the system is in a superposition of states in which each atom may scatter the photon - resulting in strong interference phenomenon. Superradiance is one of the most famous consequence, in which the scattering time scale is strongly reduced due to the atoms cooperation. The superradiance has various applications in basic and applied physics due to the capacity to create correlations between the particles and synchronize them. (1) Light propagation in the super-radiant regime (and particularly the propagation of quantum correlations) is a quite unexplored phenomenon. Understanding and characterizing it is essential to be able to use atomic entanglement in an extended cloud. The atomic long range interaction - mediated by real and virtual photons - is responsible for superradiance and has the potential to accelerate the correlations propagation. This project aims at investigating this phenomenon with the Lieb-Robinson bounds theory that describes the propagation of quantum correlations. (2) We will address not only short-range but also long-range interaction model (as both may be relevant in atomic systems). The propagation of correlations in a macroscopic system with long-range interactions will be the challenge of this project as the possibility of having accelerated time scale in such systems is still a debated question. Focusing on ultracold clouds, this work will bring answers about the creation of entanglement at a macroscopic scale.

Keywords: Atomic cloud. Quantum correlations. Superradiance.

Referências:

1 BOHNET, J. G. et al . A steady-state superradiant laser with less than one intracavity photon. **Nature**, v. 484, n. 7392, p. 78-81, 2012. doi: 10.1038/nature10920.

2 LIEB, E. H. ; ROBINSON, D. W. The finite group velocity of quantum spin systems. **Communications in Mathematical Physics**, v. 28, n. 3, p. 251-257, 1972. doi: 10.1007/BF01645779.

PG54

Structure and function studies of an endo-polygalacturonase from the Grass bacillus, *Bacillus licheniformis*.

EVANGELISTA, D. E.¹; POLIKARPOV, I.¹

daniloe@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Pectin is the major component of the middle lamella, contributing to the structure support and protection of plant tissues. Pectin is mainly composed of galacturonic acid units linked by alpha-1,4 glycosidic bonds, which is partially esterified by methyl groups. This polysaccharide is naturally degraded by pectinases, such as the Endo-polygalacturonase that randomly cleaves the alpha-1,4 bonds. Pectinases are involved in the plant cell wall development, micro-organisms enzymatic arsenal used to attack plants and have also a wide range of application in the industrial sector. There are a wide range of micro-organisms known to be efficient phytopathogens and because they are used as prospection source of plant cell wall degrading enzymes (PCWDE). One example of these micro-organisms is the *Bacillus licheniformis* (The grass bacillus). Our group had identified a large number of PCWDE genes, including pectinases, from this micro-organism. Considering the importance of pectinases in biological studies and their several industrial applications, we promote the recombinant production of an endo-polygalacturonase from *B. licheniformis*, which was purified and crystallized for biochemical and X-ray crystallographic studies. The ORF was linked into a LIC (Ligation Independent of Cloning) expression vector (1), which has a promoter induced by lactose; the thioredoxin protein to increase the solubility of the recombinant protein; and the histidine tail for easier purification. The recombinant plasmid was used to transform competent *E. coli* and the recombinant clones, which were cultivated in medium containing lactose. The recombinant clones produced a large amount of the recombinant enzymes, which were purified by affinity chromatography in a nickel column and, after cleaved the thioredoxin protein and histag a subsequently purification by nickel affinity chromatography was performed again. The recombinant enzyme activity was characterized by reduced sugars released measured by the DNS method, using 0.49% polygalacturonic acid (Sigma) solution as substrate. The recombinant enzyme shows higher activity at 58.5 °C in 100 mM Potassium phosphate buffer pH 7.0. Thermostable assay at 60 °C indicates the protein half-life after 6h of incubation and the dead protein after 18h. For crystallization screening, the sitting-drop vapor-diffusion method was used, in which 1 µL of protein solution was mixed with 1 µL of reservoir solution at 292 K. Initial crystallization screens were carried out using the automated robotic system Honey Bee 961 Dispensing System (DIGLABTM) and commercial crystallization kits (Index, Hampton research, PACT and PEGs I Suite, Qiagen). After 18 days, crystals were observed in the PACT Suite kit with 20% PEG 3,350, 100 mM Bis-Tris propane pH 6.5, 200 mM sodium fluoride as crystallization solution and (3:1 v/v) protein-to-crystallization solution ratio, using 16 mg.mL⁻¹ of protein. Unfortunately, the collected X-ray diffraction data, performed in the MX2 beamline from the LNLS, was unsatisfactory to determine the unit cell parameters of the protein crystals. The kinetic parameters V_{max}, K_m and K_{cat} are undergoing, as well as the optimized crystallization conditions.

Keywords: Endo-polygalacturonase. X-rays crystallography. Structure and function studies.

Referências:

1 CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I. High throughput cloning, expression and purification of glycoside hydrolases using Ligation Independent Cloning, LIC. **Protein Expression and Purification Journal**, v. 99, p. 35-42, 2014. doi: 10.1016/j.pep.2014.03.008.

PG55

Spatio-spectral mapping method in multispectral images and their application in plant tissues.

FALVO, M.¹; BRUNO, O. M.¹

mauricio.falvo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Multispectral images are used in different applications, ranging from remote sensing images to medical images. (1) In this paper, the multi-spectral images are obtained by fluorescence microscope in a confocal laser scanning (CLSM) (2) in plant tissues. (3) The aim of this project was to develop, implement and validate a multispectral mapping method that can visualize and assess CLSM multispectral images. The proposed method has been shown capable to analyze the plant tissue, enabling assist in plant physiology issues and also in plant identification. Experiments were performed that looked at the distribution of the concentration of lignin along the leaf structure and the variation of lignin arrangements caused by chemical agents. The results can be used to improve the understanding of the structure and leaf and its direct application, the enhancement processing methods for bio-fuels. Experiments were performed in histological sections of leaves, where it was possible to identify organelles due to its chemical composition and to analyze the concentrations of chlorophyll, carotenoids and lignin in different regions of the histological section. The results demonstrate that the technique can be used for plant identification and also to analyze the plasticity of plants, influenced by environmental variations and toxic elements such as pollutants.

Keywords: Multi-spectral images. Confocal microscopy - CLSM. Plant tissue.

Referências:

- 1 PETROU, M.; PETROU, C. **Image processing**: the fundamentals. Chichester: John Wiley, 2010. 818 p.
- 2 TAYLOR, D. L.; SALMON, E. D. Basic fluorescence microscopy. In: WANG, Y- L.; TAYLOR, D. L (Org(s)). **Fluorescence microscopy of living cells in culture**: part a - fluorescence analogs, labeling cells and basic microscopy. San Diego: Academic Press, 1989. 207-237 p.
- 3 SLAVIK, J. **Fluorescence probes in cellular and molecular biology**. Boca Raton: CRC Press, 1994. 320 p.

PG56

High-frequency polarization oscillations in spin lasers

FARIA JUNIOR, P. E.¹; XU, G.²; LEE, J.³; GERHARDT, N. C.⁴; SIPAHI, G. M.¹; ZUTIC, I.²

fariajunior.pe@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP / SUNY Buffalo

²SUNY Buffalo

³SUNY Buffalo / Universität Regensburg

⁴Ruhr-University Bochum

Spin lasers offer new opportunities for spintronic applications at room temperature. (1) In addition to the same common elements of a conventional laser, spin lasers have spin-polarized carriers which allows the output light polarization to have either positive or negative helicity. Combining the spin-polarized emission with birefringence, the frequency of oscillations in the light polarization can be higher than photon density dynamics. (2) In this study, we investigate a spin laser using a microscopic model for the band structure of the active region based on the 8x8 k.p model. We focus on a quantum well active region of AlGaAs/GaAs, also found in several commercial VCSELs. In addition to discussing the desirable properties for steady-state operation, we also show that by applying a uniaxial strain, large values of birefringence can be achieved. This suggests that the resulting oscillation frequency of the light polarization is beyond the frequency range of conventional lasers. (3)

Keywords: Spin lasers. k.p method. Quantum well.

Referências:

1 ZUTIC, I.; FARIA JUNIOR, P. E. Semiconductor lasers: taken for a spin. **Nature Nanotechnology**, v. 9, p. 750-752, 2014. doi: 10.1038/nnano.2014.228.

2 GERHARDT, N. C. et al. Ultrafast spin-induced polarization oscillations with tunable lifetime in vertical-cavity surface-emitting lasers. **Applied Physics Letters**, v. 99, n. 15, p. 151107-1-151107-3, 2011.

3 FARIA JUNIOR, P. E. et al. Toward high-frequency operation of spin lasers. **Physical Review B**, v. 92, n. 7, p. 075311-1-075311-14, 2015.

PG57

Distribuição de dose limiar e suas causas e consequências em terapia fotodinâmica

FARIA, C. M. G.¹; INADA, N. I.¹; BAGNATO, V.S.¹

claramgf@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

São muitos os grupos de pesquisa na área de terapia fotodinâmica (TFD). Este ano, já foram publicados mais de 2000 trabalhos na literatura sobre a terapia fotodinâmica. Apesar da grande quantidade de grupos de pesquisa na área, ainda existem desafios importantes a serem entendidos, pois há grande variabilidade dos resultados publicados. Esta é a grande causa desta modalidade terapêutica não ter conquistado um espaço maior no cenário clínico. Os parâmetros dos tratamentos são baseados na administração empírica de doses de fotossensibilizador e luz, em que são presentes variáveis intrínsecas como distribuição e farmacocinética do fotossensibilizador(FS), propriedades ópticas do tecido e oxigenação local. (1) Este projeto tem por objetivo o avanço do estado da arte da técnica, por meio da investigação das causas dessa variabilidade. Será utilizado um modelo de distribuição de limiar de dose para avaliar a resistência celular à TFD. Já é entendido que fatores como a localização do FS, as vias de sinalização ativadas e o tipo de morte celular são fatores importantes envolvidos. (2,3) A partir de comparações quantitativas das curvas de distribuição, obtidas em diferentes condições de tratamento, será investigada a relação entre parâmetros da TFD e resistência celular. As condições incluem diferentes concentrações de fotossensibilizador (Photogem e Clorina e6), tempo de incubação, e doses de luz em culturas de células e microrganismos. Após as aplicações de TFD, a viabilidade celular será analisada por MTT e análise de fluorescência. Portanto, acreditamos que o projeto expandirá o entendimento dos mecanismos da TFD, o que permite o avanço dessa técnica.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Resistência celular. Distribuição dose limiar.

Referências:

- 1 AGOSTINIS, P. et al. Photodynamic therapy of cancer: an update. **CA: A Cancer Journal for Clinicians**, v. 61, p. 250-281, 2011.
- 2 ALLISON, R. R.; MOGHISSI, K. Photodynamic therapy (PDT): PDT mechanisms. **Clinical Endoscopy**, v. 46, n. 1, p. 24-29, 2013.
- 3 CAPELLA, M. A. M.; CAPELLA, L. S. A light in multidrug resistance: photodynamic treatment of multidrug resistant tumors. **Journal of Biomedical Science**, v. 10, n. 4, p. 361, 2003.

PG58

Gold nanoparticles enhanced electrochemical signal in Polyethylene terephthalate/gold electrodes

FARIA, H. A. M.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

henrique.fisica@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Self-organization of nanomaterials confined in thin films is an important feature for development and sensor applications. (1) Control of the surface chemistry is essential for assuring high reactivity, orientation and stability of biomolecules immobilized on the biosensor. In spite of several useful strategies for attaching nanoparticles onto an electrode surface (2), the use of thiol groups appears as an effective route for fabrication of nanostructured biosensors. In this study, we report a fabrication of gold electrode conjugated with gold nanoparticles (AuNPs) using 2-Mercaptoethanol. Polyethylene terephthalate substrate was metallized by thermal evaporation and gold nanoparticles was functionalized onto gold surface. AFM analyses revealed that the AuNPs had been efficiently attached to the gold surface. The electrochemical signal by cyclic voltammetry showed an enhanced of 0.11 mA in cathodic current peak in AuNPs functionalized electrode. The nanoconjugates developed here represent an alternative route for fabrication of biorecognition layers for nucleic acids biosensors platforms.

Keywords: Electrochemical biosensor. Gold nanoparticles. Cyclic voltammetry.

Referências:

1 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, 2015. doi: 10.1002/celc.201500008.

2 WANG, J. Electrochemical nucleic acid biosensors. In: PALECEK, E. **Towards electrochemical sensors for genomics and proteomics**. Amsterdam: Elsevier, 2005. 175 p.

PG59

Busca de moldes estruturais para a engenharia de funções catalíticas

FARRO, E. S.¹; GARRATT, R. C.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

esuclupf@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Sabe-se que as proteínas evoluíram para desenvolver uma estrutura estável e ótima para o exercício do seu papel funcional; a estrutura da macromolécula determina de forma direta o desempenho da sua função biológica e é determinada pela sequência de aminoácidos da proteína, de forma que uma relação sequência - estrutura - função pode ser traçada. Esta relação adquire um interesse especial no contexto da engenharia de proteínas, onde novas funções (e.g. catalíticas) são introduzidas artificialmente em proteínas já existentes ou em novas moléculas proteicas.(1) Para esta finalidade, é importante que se responda à seguinte questão: qual é a mínima informação estrutural necessária para se introduzir uma função? Para o início do trabalho partiu-se da estrutura 2VTC da família AA9 (anteriormente GH61) que tem função monoxigenase e sítio ativo formado por duas histidinas (H1 e H89) e uma tirosina (Y176) coordenando um átomo de níquel. As análises para a procura dos motivos estruturais foi feita nos softwares SPASM e SMatch, onde foi possível encontrar duas arabinanases, hidrolases de polímeros de L-arabinose, que pertencem à família GH43. Os genes das arabinanases foram amplificados da biblioteca de cDNA de *Bacillus licheniformis*, e clonados em vetor pETTRX, pelo método LIC. O meio autoindutor foi usado para a expressão e a purificação feita em três passos (afinidade, troca iônica e exclusão molecular). Testou-se a estabilidade térmica mediante o método DSF (Differential Scanning Fluorimetry) com metais bivalentes, onde observou-se que o cobalto resultou em maior estabilidade (de 51°C para 61°C). Um único cristal foi obtido a partir de uma concentração de 17 mg/mL da enzima BIAbn1, usando o kit Crystal Screen (Hampton). Um conjunto de dados foi coletado a 2.7 Å em um anodo rotatório. A estrutura foi resolvida por substituição molecular e o refinamento encontra-se em andamento. Os testes da atividade hidrolítica para a enzima BIAbn1 mostraram melhor atividade sobre arabinano desramificado em pH 8.0 e temperatura de 45°C, com uma concentração de 75nM de BIAbn-1 e obtendo uma atividade específica de 85 U/min. Também foi testado a atividade com metais bivalentes, onde a atividade enzimática melhorou com todos os metais usados, . Sendo Sr²⁺, Mn²⁺ e Ca²⁺ os metais que resultaram em maior ganho de atividade.(2) Os testes iniciais para a determinação de atividade oxidativa foram feitos em um volume final de 1 mL, com 50% PASC (v/v) como substrato, 25mM tampão acetato de amônio, 5mM NaCl, 1mM ácido ascórbico, 10uM de MnCl₂ e 1uM BIAbn-1, incubado por 24hrs a 30°C e 900rpm.(3) O análises do produto se determinou por MALDI TOF-MS. Foi possível observar vários graus de polimerização que ainda estão em análises para sua correta determinação. O protocolo deste experimento ainda está sendo melhorado.

Palavras-chave: Moldes estruturais. 1 5- α -L-arabinanase. Função oxidativa.

Referências:

- 1 KLEYWEGT, G.. Recognition of spatial motifs in protein structures. **Journal of Molecular Biology**, v. 285, n. 4, p. 1887-1897, 1999.
- 2 SEO ES, L. et al. Characterization of a recombinant endo-1 5-alpha-L-arabinanase from the isolated bacterium *Bacillus licheniformis*. **Biotechnology and Bioprocess Engineering**, v. 15, n. 4, p. 590-4, 2010. doi: 10.1007/s12257-009-3138-5.
- 3 VAAJE-KOLSTAD, G. et al. An oxidative enzyme boosting the enzymatic conversion of recalcitrant polysaccharides. **Science**, v. 330, n. 6001, p. 219-222, 2010. doi: 10.1126/science.1192231.

PG60

Proteínas MEGs de *S. mansoni* : um estudo estrutural, funcional e de interação com proteínas e células humanas.

FELIZATTI, A. P.¹; DeMARCO, R.¹

anafelizatti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A esquistossomose é uma doença parasitária responsável por milhares de óbitos anuais, predominantemente em países subdesenvolvidos. No Brasil, ocorre devido a espécie *S. mansoni*, na qual foi verificado um grupo de genes que possuía em média 75% dos genes da porção codificante compostos por *micro-exons*, sendo esta classe de genes denominada *Micro-Exon Genes (MEGs)*. Sequenciamento de transcritos e análises proteômicas indicam produção de proteínas variantes resultantes de *splicing* alternativo destes genes. (1-2) Essas variações podem estar relacionadas com a capacidade de permanência do helminto em humanos sem que o sistema imune o reconheça, auxiliando um mecanismo de escape ainda não esclarecido, mas que pode estar justamente relacionado a interação entre proteínas secretadas pelo verme e proteínas do hospedeiro. O objetivo do estudo das MEGs é entender como elas podem estar relacionados com mecanismos de defesa humana diante a infecção. Neste projeto pretendemos estudar as proteínas MEG-10, MEG-10.2, MEG-11, MEG-26, MEG-27 e MEG-28. Através dos resultados de clonagem e expressão heteróloga iremos selecionar aquelas com melhor expressão, estabilidade e rendimento para : Determinar a estrutura secundária em diferentes condições via dicroísmo circular; Estabelecer o estado de oligomerização por meio de gel filtração e *cross-linking*; Estabelecer o local de expressão por *WISH*; Busca de parceiros de interações para MEGs selecionadas via duplo híbrido e validação desses parceiros por *PullDown* e Ressonância Plasmônica de Superfície e também estudo de alterações do estado termodinâmico resultante de interações via Calorimetria de Titulação Isotérmica. Também serão testadas a capacidade hemolítica e citotóxica, pela análise *in vitro* da interação entre MEGs e eritrócitos e leucócitos humanos. Para obtenção das proteínas realizamos a extração de RNA de vermes adultos para reação de transcrição reversa com primers previamente desenhados para as sequências de interesse, amplificação dos cDNAs e tentativas iniciais de clonagem e expressão, utilizando o sequenciamento Sanger para confirmar a obtenção dos genes. Até o presente temos a proteína MEG-27 heteróloga, com clonagem em *E. coli* DH5a(DE3), vetor pGEM, e expressão em *E. coli* Rosetta(DE3), vetor pETSUMO. A purificação foi feita em coluna de níquel e exclusão molecular, e a confirmação da obtenção da proteína foi feita por Espectrometria de Massas. Ensaio iniciais de dicroísmo circular indicaram que a proteína heteróloga, apesar de estável e com pureza satisfatória, não se encontrava enovelada, tornando-se estruturada apenas com a adição do reagente TFE, indutor de enovelamento. A análise de dicroísmo circular com o peptídeo sintético por sua vez, mostrou uma estrutura secundária mais confiável, na forma helicoidal, e prosseguiremos com os estudos estruturais anteriormente citados. O experimento de duplo-híbrido está sendo realizado inicialmente com a proteína MEG-11 (cujo protocolo de expressão e purificação já fora feito) e os resultados dos testes de toxicidade e autoativação foram negativos, possibilitando o início da varredura para busca de parceiros de interação, fase em andamento. A proteína MEG-28 encontra-se insolúvel até o momento, e novas condições serão testadas visando sua solubilização ou expressão em corpos de inclusão. As demais proteínas (MEGs-10, 10.2, 26) ainda estão

em fase de clonagem.

Palavras-chave: Micro-éxon genes. Schistosoma Mansonii. Esquistossomose.

Referências:

1 BERRIMAN, M. et al. The genome of the blood fluke Schistosoma mansoni. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 352-358, 2009. doi: 10.1038/nature08160.

2 DeMARCO, R. et al. Protein variation in blood-dwelling schistosome worms generated by differential splicing of micro-exon gene transcripts. **Genome Research**, v. 20, n. 8, p. 1112-1121, 2010.

PG61

Escherichia coli Selenocysteine specific Elongation factor to (SelB) and Seryl-tRNA synthetase (SerRS) interaction with tRNA^{Sec}

FERNANDES, A. de F.¹; SERRÃO, V. H. B.¹; BASSO, L. G. M.²; CRUSCA JUNIOR, E.¹; THIEMANN, O. H.¹

adriano.fernandes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

The study of protein translation is a central mechanism in cellular metabolism, in particular, the incorporation of non canonical amino acids, such as selenocysteine and pyrrolysine, resulting in the expansion of genetic code to 22 amino acids. (1) Selenocysteine (Sec, U) represents the main biological form of the element selenium and its incorporation into selenoproteins at an in phase UGA-encoded codon requires a complex molecular machinery. The specific Sec incorporation pathway begins with the L-adenylation of amino acid serine (L-Ser) by Seryl-tRNA Synthetase (SerRS) with the consumption of ATP and the further transfer of L-serine to tRNA^{Sec}, resulting in Ser-tRNA[Ser]Sec. The Ser-tRNA [Ser]Sec is delivered to the Selenocysteine Synthase (Sela) for selenocysteinyl-tRNA^{Sec} (Sec-tRNA^{Sec}) synthesis. (2) Then, Sec-tRNA^{Sec} is delivered to the Selenocysteine Specific Elongation Factor to (SelB) for incorporation into the nascent polypeptide chain in the ribosome. (3) This project aims for the molecular characterization of the interactions of both SelB and SerRS with different mutants of tRNA^{Sec} of Escherichia coli to understand their specificity and selectivity. In this study, a new SelB purification protocol was established. Fluorescence Anisotropy Spectroscopy assays show that SelB interacts with tRNA^{Sec} in the presence of GTP with a dissociation constant of (248 ± 59) nM and a cooperativity parameter of (1.7 ± 0.7) , which suggests a cooperativity in the formation of the ternary complex SelB-GTP-tRNA^{Sec}. The formation of this complex was further corroborated by Differential Scanning Calorimetry and Intrinsic Fluorescence Spectroscopy. The results of this work can improve the understanding of Sec incorporation into selenoproteins as well as elucidate the importance of tRNA structural elements for specificity.

Keywords: Selenocysteine. Protein-RNA interaction. Elongation factor.

Referências:

- 1 BOCK, A. et al. Selenocysteine: the 21st amino acid. **Molecular Microbiology**, v. 5, n. 3, p. 515-520, 1991.
- 2 THANBICHLER, M. R. **Der translationsfaktor SelB: mechanismus der UGA-Dekodierung und funktion in der regulation der genexpression**. 2002. 159p. Dissertation (Master) - LMU München: Faculty of Biology, LMU München, Munique, 2003.
- 3 SANDMAN, K. E.; NOREN, C. J. The efficiency of Escherichia coli selenocysteine insertion is influenced



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

by the immediate downstream nucleotide. **Nucleic Acids Research**, v. 28, n. 3, p. 755-761, 2000.

PG62

Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores multi-core

FERREIRA, F.¹; TRAVIESO, G.¹; RUGGIERO, C. A.¹

felipe2.ferreira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A tarefa de utilizar toda a capacidade de processamento dos processadores *multi-core* atuais é difícil, pois requer o uso de técnicas de programação não triviais para garantir a sincronização necessária. E esta dificuldade deve aumentar, pois a tendência é de que o número de núcleos dos novos processadores *multi-core* seja ainda maior. (1) É nesse cenário que os modelos a fluxo de dados voltam à tona, como neste modelo o paradigma de execução é baseado na disponibilidade dos dados, a necessidade de explicitar as operações de sincronização deixa de existir, essa característica também permite extrair, de maneira implícita, o paralelismo disponível no código. (2) O modelo em desenvolvimento utiliza os conceitos de fluxo de dados com granularidade grossa. Neste caso as fichas rotuladas são chamadas de *codelets*: um *codelet* é uma estrutura de dados que possui uma instrução que será executada, um conjunto de entradas necessário para executar a instrução e um conjunto de saídas. Quando todas as entradas estão disponíveis o *codelet* está apto a ser executado. O modelo é do tipo *thread-pool*, onde todas as *threads* existem desde o início da execução do programa, além disso há dois tipos de *thread*: a *master thread*, responsável por criar os *codelets* necessários para o início do programa e as *worker threads*, que executam os *codelets* disponíveis; uma *worker thread* também pode criar um *codelet* a partir de outros *codelets*. Depois de criar todos os *codelets* necessários a *master thread* se torna uma *worker thread*. Como o foco do desenvolvimento é a criação de um modelo eficaz nos próximos processadores *multi-core*, chamados de *many-core* devido ao alto número de núcleos, é necessário executar as aplicações desenvolvidas em um simulador. (3) Para permitir uma melhor análise e validação do simulador as aplicações também são executadas em uma máquina real.

Palavras-chave: Modelo de Execução. Fluxo de Dados. Computação Paralela.

Referências:

- 1 CLARK, M. T.; HOFSTEE, P.; BARRAGY, E. J.; BUCK, I.; KECKLER, S. W. The future of multi-core technologies. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON CLUSTER COMPUTING, 2007, Austin. **Proceedings...** Piscataway: Institute of Electrical and Electronics Engineers - IEEE, 2007, p. xvi.
- 2 KYRIACOU, C.; EVRIPIDOU, P.; TRANCOSO, P. Data-Driven multithreading using conventional microprocessors. **IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems**, v. 17, n. 10, p. 1176-1188, 2006. doi: 10.1109/TPDS.2006.136.
- 3 SANCHEZ, D.; KOZYRAKIS, C. ZSim: fast and accurate microarchitectural simulation of thousand-core systems. **ACM SIGARCH Computer Architecture News**, v. 41, n. 3, p. 475-486, 2013. doi:



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

10.1145/2508148.2485963.

PG63

Experimental and theoretical investigation of two-photon absorption in branched molecular systems

FONSECA, R. D.¹; VIVAS, M. G.²; SILVA, D. L.³; DE BONI, L.¹; MENDONÇA, C. R.¹

rubenfonseca@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciência de Tecnologia - UNIFAL

³Departamento de Ciências da Natureza, Matemática e Educação - UFSCar

Two-photon absorption (2PA) is a process in which an atom or molecule simultaneously absorbs two photons, which can have the same or different energies. Due to their remarkable features for various applications, such as three-dimensional (3D) optical data storage, photodynamic therapy, fluorescence imaging, optical limiting, and so on, considerable interest has been devoted to the development of organic materials with large TPA cross-sections. (1) Organic compounds provide advantages in relation to other types of materials since their optical properties can be easily modified or optimized by molecular engineering. (2) Various design strategies have been employed to synthesize organic molecules, in an attempt to achieve higher 2PA cross-sections. The purpose of this study is to investigate the 2PA of nine molecular branched systems arranged in dipolar, quadrupolar and octopolar geometries. This nonlinear optical measurements were carried out employing the open aperture Z-scan technique, using 120-fs laser pulses from an optical parametric amplifier pumped by 150-fs pulses (775 nm) from a Ti:sapphire chirped-pulsed-amplified system, operating at 1 kHz repetition rate. For each wavelength the pulse energy was kept between 20 and 120 nJ. 2PA was determined by translating the sample through the focal plane of a focused Gaussian beam, while transmittance changes in the far field intensity are monitored. The experimental data revealed well-defined 2PA spectra, with reasonable cross-section values in the visible and IR. Using the theoretical calculations, based on density functional theory (DFT), we were able to interpret the experimental 2PA spectra.

Keywords: Two-photon absorption. Nonlinear optics. Z-scan technique.

Referências:

- 1 VIVAS, M. G. et al. Linear and nonlinear optical properties of the thiophene/phenylene-based oligomer and polymer. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 115, n. 44, p. 12687-12693, 2011.
- 2 VIVAS, M. G. et al. Two-photon absorption spectra of carotenoids compounds. **Journal of Applied Physics**, v. 109, n. 10, p. 103529-1-103529-8, 2011.

PG64

Medidas de refletância difusa para o aprimoramento da dosimetria para fototerapias

FORTUNATO, T. C.¹; KURACHI, C.¹; BAGNATO, V. S.¹; MORIYAMA, L. T.¹

thereza.fortunato@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A propagação da luz nos tecidos biológicos depende das propriedades ópticas dos tecidos, e tais propriedades podem variar de indivíduo para indivíduo e de tecido para tecido, o que dificulta o estabelecimento de uma dosimetria para as fototerapias. (1) Neste contexto, torna-se primordial pesquisas voltadas para o desenvolvimento de métodos que sejam capazes de determinar a distribuição espacial da luz nos tecidos biológicos de maneira individualizada, permitindo assim a individualização também da dosimetria. Este projeto tem por objetivo utilizar imagens de refletância difusa emitida por phantoms ópticos para inferir a distribuição espacial da luz, buscando a possibilidade de prever a existência de heterogeneidades em seu interior que possam comprometer a propagação da luz. Para isso foram realizadas medidas em phantoms ópticos espalhadores (líquido e sólidos), contendo heterogeneidades absorvedoras de diferentes geometrias. A influência da distância da fonte à heterogeneidade, do ângulo de incidência, da profundidade e da forma da heterogeneidade na refletância superficial foram analisadas.

Palavras-chave: Refletância difusa. Phantom óptico. Dosimetria.

Referências:

1 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions**: fundamentals and applications. Berlin: Springer, 1996. 297 p.

PG65

Estudo das propriedades físico-químicas do plasma para quantificação de carbono em solos usando espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser

FRANCO, M. A. M.¹; MARANGONI, B. S.²; MILORI, D. M. B. P.³; VILLAS BOAS, P. R.³

marco.franco@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP e Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

³Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

O estudo da composição química dos solos é de extrema importância para o desenvolvimento sustentável da agricultura e para a preservação do meio ambiente por ser o principal substrato utilizado pelas plantas para o seu crescimento e disseminação, fornecendo água e nutrientes. Em especial, o carbono presente nos solos apresenta papel fundamental no ciclo biogeoquímico do planeta. No entanto, ainda não existem técnicas ou equipamentos capazes de avaliar de forma ampla, rápida e eficaz vários elementos de uma só vez em campo. Para superar essa dificuldade, o grupo de Ótica e Fotônica da Embrapa Instrumentação tem trabalhado com a espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser (LIBS). A LIBS é uma técnica de análise química multi-elementar, largamente empregada nos últimos anos, com potencial de ser empregada in situ. (1) Esta técnica utiliza pulsos de laser de alta energia como fonte de excitação, o qual é focalizado diretamente na amostra para gerar plasma com temperaturas da ordem de 104 K. Após alguns nanossegundos, quando o plasma está menos quente, é possível identificar os elementos químicos presentes na amostra através da radiação emitida por eles. Entretanto, a técnica apresenta dificuldades relacionadas à sua sensibilidade aos efeitos de matriz, o que atrapalha significativamente análises elementares quantitativas precisas. Efeitos de matriz são entendidos como uma forte dependência do espectro de emissão atômico obtido com os comprimentos de onda emitidos e com a distribuição dos componentes químicos presentes na superfície das amostras. (2) Além disso, as condições de formação do plasma não são fixas em LIBS, uma vez que elas estão vinculadas às flutuações na potência do laser, aos parâmetros geométricos do experimento, a atmosfera ambiente e ao processo de ablação na amostra. Estudos anteriores avaliaram esses efeitos em linhas atômicas de Mg, Si, Mn e Cu em diferentes matrizes metálicas, como ligas de aço e alumínio, através da técnica LIBS. (3) Foi encontrada forte dependência da temperatura do plasma e sua densidade de elétrons com o potencial de ionização do elemento químico majoritário presente na amostra. Isso sugere que podem existir soluções cuja concentração elementar consiga minimizar os efeitos de matriz nas amostras. Dessa forma, objetiva-se estudar efeitos de matriz em algumas linhas de emissão do carbono, como 193,04 e 247,86 nm, em amostras de solo constituídas por soluções de KBr e ácido bórico e diferentes teores de carbono. Como os elementos constituintes daqueles compostos apresentam potenciais de ionização distintos, espera-se encontrar uma concentração de solução sólida mínima necessária para reduzir os efeitos de matriz. Para tanto, serão feitos estudos das condições de equilíbrio termodinâmico local do plasma LIBS formado com amostras mistas de KBr, ácido bórico e grafite.

Palavras-chave: LIBS. Linha de emissão. Carbono.

Referências:

1 NOLL, R. **Laser-induced breakdown spectroscopy**: fundamentals and applications. Berlin: Springer, 2012. 544 p.

2 BULATOV, V.; KRASNIKER, R.; SCHECHTER, I. Study of matrix effects in laser plasma spectroscopy by combined multifiber spatial and temporal resolutions. **Analytical Chemistry**, v. 70, n. 24, p. 5302-5311, 1998. doi: 10.1021/ac9805910.

3 ISMAIL, M. A.; IMAM, H.; ELHASSAN, A.; YOUNISS, W. T.; HARITH, M. A. LIBS limit of detection and plasma parameters of some elements in two different metallic matrices. **Journal of Analytical Atomic Spectrometry**, v. 19, n. 4, p. 489-494, 2004. doi: 10.1039/b315588a.

PG66

Dependência não linear observada na amplitude do modo quadrupolar de um condensado de Bose-Einstein

FRITISCH, A. R.¹; TAVARES, P. E. S.¹; VIVANCO, F. A. J.¹; TELLES, G. D.¹; HENN, E. A. L.¹; BAGNATO, V. S.¹

amilson.fis@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os modos coletivos são os movimentos oscilatórios da distribuição de densidade do condensado, que podem ser oscilações da forma ou do centro de massa da nuvem. Basicamente os modos coletivos surgem das excitações coletivas das soluções estacionárias da equação de Gross-Pitaevskii na presença de um potencial confinante. Neste trabalho estudamos o comportamento dos modos coletivos em um condensado de Bose-Einstein de ^{87}Rb . Os modos foram induzidos por um campo magnético externo oscilante produzido por um par de bobinas sobrepostas ao campo da armadilha, a mesma configuração utilizada no passado para produzir turbulência. (1) Com este método de perturbação os modos dipolar, quadrupolar e scissors puderam ser observados e seus comportamentos analisados em função da amplitude e frequência da excitação externa. (2) Para esse estudo, produzimos condensados de Bose-Einstein em uma armadilha do tipo QUIC (Quadrupole Ioffe Configuration) e antes de ser liberado da armadilha o campo magnético oscilatório é superposto ao potencial da armadilha, produzindo as excitações no condensado. A frequência de excitação foi mantida fixa em um valor próximo a uma das frequências da nossa armadilha. Terminada a excitação a nuvem fica presa na armadilha por um tempo que denominamos t_{hold} , que nos fornece informações do comportamento do condensado após a excitação. Decorrido este t_{hold} , a nuvem é liberada da armadilha, e após um tempo de voo é feita uma imagem de absorção da nuvem que nos fornece as informações relevantes para as análises. Verificamos que a amplitude do modo dipolar varia linearmente em função da amplitude de excitação externa. No entanto, para excitar o modo quadrupolar de forma efetiva verificamos que é necessário uma energia mínima, comportamento que ainda não havia sido reportado. Uma segunda linha de pesquisa do nosso grupo está direcionada para o estudo do decaimento de um vórtice multicarregado. Atualmente produzimos um vórtice multicarregado por meio do método de impressão de fase topológica, que consiste em inverter o bias da armadilha magnética. Este método é capaz de produzir um vórtice com carga múltipla do estado magnético hiperfino do átomo. Como vórtices multicarregados são instáveis esperamos observar seu decaimento para quatro vórtices com carga unitária e, possivelmente, encontrarmos uma rota para emaranhar esses vórtices, obtendo um regime de turbulência quântica.

Palavras-chave: Modos coletivos. Condensado de Bose-Einstein. Vórtices.

Referências:

1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, p. 45301, 2009. doi: 10.1103/PhysRevLett.103.045301.

2 FRITSCH, A. R.; TAVARES, P. E. S.; BAHRAMI, A.; TONIN, Y. R.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S.; TELLES, G. D.. Nonlinear dependence observed in quadrupolar collective excitation of a trapped BEC. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 180, p. 144, 2015. doi: 10.1007/s10909-015-1307-9.

PG67

Computational studies on *Plasmodium falciparum* N-Myristoyltransferase enzyme and its inhibitors as antimalarial candidates

GARCIA, M. L.¹; GUIDO, R. V. C.¹

mariana.lopes.garcia@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Malaria is an infectious disease caused by protozoan parasites of the genus *Plasmodium*. The most deadly form of malaria in humans is due to *Plasmodium falciparum*. Since existing therapies are no longer sufficient for malaria treatment and control, great efforts for new drug development are required. N-myristoyltransferase (NMT, EC 2.3.1.97) has been investigated as a molecular target candidate for drug development against parasitic diseases. Recently, NMT was confirmed as an essential and chemically tractable target in malaria parasites. (1) On the basis of that, the discovery of new bioactive compounds as NMT inhibitors is an attractive approach for the development of new drugs against malaria. The main objective of this project is to shed light on the structural and molecular requirements underlying the inhibitory activity of benzothiophene derivatives as drug candidates for malaria. In this sense, the specific objectives include: data set selection; 2D and 3D Quantitative Structure-Activity Relationship (2D and 3D QSAR, respectively) studies; *Pf*NMT homology modeling; identification of the molecular bases for the development of new potent antimalarial drug candidates. A series of 39 benzothiophene derivatives as NMT inhibitors was selected from the literature. (2) The K_i values (i.e., inhibitor constant) were converted into $pK_i = -\log K_i$. The pK_i values comprise about 3 orders of magnitude of biological activity distribution. Therefore, the data set is suitable for QSAR studies. We will employ the following methods to explore the molecular features underlying the biological activity of the benzothiophene derivatives: Hologram QSAR (HQSAR) which is a 2D QSAR method that generates molecular hologram from 2D molecular fragmentation; Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA), which is a 3D QSAR method based on the principal that bioactive molecules act through 3D interactions (stereochemical and electrostatic interactions) and Comparative Molecular Similarity Index Analysis (CoMSIA), which is an alternative 3D QSAR method based on the same principal of CoMFA, but it uses different strategies for computing molecular descriptors, thereby allowing the inclusion of additional molecular fields related to relevant physical chemical properties to biological activity (i.e., hydrophobic and hydrogen bonds). (3) Furthermore, homology modeling of *Pf*NMT will be conducted, since the target structure is not experimentally determined. In sum, the integrated molecular modeling strategy will provide the structural basis for *Pf*NMT inhibition.

Keywords: Drug design. QSAR models. Malaria.

Referências:

1 WRIGHT, M. H. et al. Validation of N-myristoyltransferase as an antimalarial drug target using an integrated chemical biology approach. **Nature Chemistry**, v. 6, p. 112-121, 2014. doi: 10.1038/nchem.1830.

2 RACKHAM, M. D. et al. Discovery of novel and ligand-efficient inhibitors of Plasmodium falciparum and Plasmodium vivax N-myristoyltransferase. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 56, n. 1, p. 371-375, 2013. doi: 10.1021/jm301474t.

3 GUIDO, R. V. C.; OLIVA, G.; ANDRICOPULO, A. D. Structure- and ligand-based drug design approaches for neglected tropical diseases. **Pure and Applied Chemistry**, v. 84, n. 9, p. 1857-1866, 2012. doi: 10.1351/PAC-CON-11-11-07.

PG68

Critical exponents of the XX spin-1/2 chain under correlated disorder

GETELINA, J. C.¹; HOYOS, J. A.¹

jc_getelina@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

A recent study shows that making the random couplings locally correlated in the XX spin-1/2 chain gives rise to an unusual critical behavior, where the clean exponent values are preserved for weak disorder and some exponents change as disorder gets stronger, resulting in a family of finite-disorder critical points. (1) However, a complete study of the critical behavior of this model is still lacking. We investigate this model by diagonalizing its Hamiltonian numerically and averaging each observable over various disorder realizations. The random couplings are generated by a box probability distribution which is parameterized by the so-called disorder strength. We calculate all the standard critical exponents for various disorder strength and check the validity of the scaling relations. It is shown that two of four scaling relations are respected; the relations containing the system dimension do not hold. Moreover, we also show the relation between the dynamical exponent and the exponents of the specific heat and magnetic susceptibility. This relation can be predicted by the renormalization group approach.

Keywords: Phase transitions. Disordered systems. Spin chains.

Referências:

1 HOYOS, J. A.; LAFLORENCIE, N.; VIEIRA, A. P.; VOJTA, T. Protecting clean critical point by local disorder correlations. **Europhysics Letters**, v. 93, p. 30004, 2011. doi: 10.1209/0295-5075/93/30004

PG69

Development of a nonlinear optical microscopy by rotation of elliptical polarization

GOMES, J. A. C.¹; MISOGUTI, L.¹

jorge_coura@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Three-dimensional images of complex structures can be obtained using nonlinear optical microscopy. Nowadays, nonlinear optical signals become very easy to be obtained with ultrashort laser pulses and, consequently, several areas take benefit of such pulses, including the nonlinear microscopy. There are various nonlinear optical processes that can be used in microscopy; for example, the third-harmonic generation or the fluorescence induced by two-photon absorption, which can provide information regarding an object interfaces and about internal volume, respectively. Also, each nonlinear effect has its own advantage and complexity, and in this way, finds a new type of nonlinear effect, or contrast, is welcome. Recently we have developed a new simple and precise method to measure nonlinear ellipse rotation (NER) using a phase sensitive method by means of dual phase lock-in amplifier. (1) Indeed, the NER signal, a third-order optical nonlinear effect, is a good candidate for nonlinear microscopy and it was not explored in this context. (2) Therefore, we propose to use NER signal for such important application. Here we show the preliminary results of this use for nonlinear microscopy. We did some fundamental studies where a cuvette filled with different solvents was used to study two types of nonlinearities: electronic and orientational, and also, for microscopy point of view, we could distinguish the cuvette walls and the internal solvent, separately. In this case, the spatial resolution is determined by the confocal length and the beam waist size. Finally, we also did NER images of onion cells stacked between two cover glasses slits with use of 40x objective. Relatively good images of onion cells could be obtained considering that no special treatment was done on the samples. There are several improvements in terms of spatial resolution, signal-to-noise ratio, speed, etc. to be done in the next period. As we know, one of the main challenges in biological image is related to the turbid media which light scattering prevents good images acquisition.

Keywords: Ultrafast laser. Polarization rotation. Nonlinear microscopy.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Accurate measurement of nonlinear ellipse rotation using a phase-sensitive method. **Optics Express**, v. 22, n. 21, p. 25530-25538, 2014. doi: 10.1364/OE.22.025530.

2 MASTERS, B. R. **Confocal microscopy and multiphoton excitation microscopy**: the genesis of live cell imaging. Bellingham: SPIE, 2006. 209 p.

PG70**Two-body Förster resonances in Rydberg states**GONÇALVES, L. F.¹; MARCASSA, L. G.¹

luisfelipe@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Förster resonances are commonly used as an attempt to explain several phenomena; the range of applications goes from biophysical system to even high-interacting atomic vapors. In this work we present a review of the recent experiments performed in our group that confirm that, the population transfer between $nD + nD$ Rydberg states is fully explained using only pairwise interactions. For a long time the most accepted theory, in the context of population transfer between Rydberg atoms, was that this is an effect of a multi-body system. In controversy, our recent works shows that this effect is plainly dominated by two body interactions.(1-3) We showed that the same transfer rates, that were observed previously by other groups and explained as many-body effects, are in reality pure two body effect. The binary dependency of the interactions is incontestable due to the quadratic character of the transferred population as a function of the initial excited state. We present here two experiments that validate our theory. One shows the dependency of the transferred population for the resonance $nD + nD \rightarrow (n+2)P + (n-2)L, L \geq 4$. (2) This resonance is dominated by a quadratic dependency of the initial nD state even when the density of the cold sample reaches 3×10^{12} atoms/cm³. This density is so high that the excitation of Rydberg atoms achieves saturation, due to the dipole blockade. We showed that even in this high-density, and high-interacting sample, the transfer rates are still quadratic for a range of $n = 37$ to 45. The second experiment shows that at a state where the transfer rate is initially low; one can easily tune the resonance with an external perturbation to achieve higher rates.(1,3) We particularly used an external electric field to tune the resonances in the state $37D + 37D$. We showed that the product population can be surprisingly increased only by tuning the field, and also that several resonances starts appearing as a function of this field. These resonances are related to the energy crossings between the excited and the product state due to the Stark effect. Here again, the product population is quadratically dependent on the excited state. More interesting is that the resonance lines are broadened due to the increase of the sample density, until it reaches saturation. This happens because, as it is still a pairwise interaction, at higher densities the system start accessing the inner parts of the atomic potential, and in this region the energy levels are no longer degenerate, and the state-mixing starts to broaden the atomic lines. Our work is of great relevance for the study of Rydberg interactions, there are several proposals of using Rydberg atoms as qubits for quantum computation. For this application the system must be very well controlled, and free of interactions that lead to incoherent processes, like state transfer due to binary interactions, that can destroy the qubit. Our simplified model of controllable and tunable binary interactions may help finding states and conditions where these losses are minimized.

Keywords: Rydberg atoms. State transfer. Förster resonances.**Referências:**

- 1 CABRAL, J. S. et al.. Effects of electric fields on ultracold Rydberg atom interactions. **Journal of Physics B: atomic, molecular and optical physics**, v. 44, n. 18, p. 184007, 2011. doi: 10.1088/0953-4075/44/18/184007.
- 2 KONDO, J. M. et al.. Two-body Förster resonance involving Rb nD states in a quasi-electrostatic trap. **Physical Review A**, v. 90, n. 2, p. 023413, 2014. doi: 10.1103/PhysRevA.90.023413.
- 3 KONDO, J. M. et al. The role of multi-level Rydberg interaction in electric field tuned Förster. **Physical Review Letters**. Submitted.

PG71

Sistema de localização de linfonodo sentinela com a utilização de fluorescência de campo amplo.

GOVONE, A. B.¹; GÓMEZ-GARCIA, P. A.²; ROSA, R. G. T.¹; CAPUZZO, R. C.³; CARVALHO, A. L.³; MAGALHÃES, D. V.⁴; KURACHI, C.¹

govone.angelo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidad Carlos III de Madrid

³Hospital de Câncer de Barretos

⁴Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Com a cirurgia de ressecção de tumor, faz-se necessário localizar o linfonodo sentinela deste tumor, afim de impedir que células malignas presentes neste linfonodo se espalhem pelo organismo. (1) Porém encontrar o linfonodo sentinela ainda é um grande desafio para a equipe médica. Isso ocorre pelo fato dos linfonodos estarem localizados próximos as fibras musculares, dificultando a visualização. Buscando auxiliar o cirurgião nessa busca, a presente pesquisa está desenvolvendo equipamento de fluorescência, capaz de localizar o linfonodo sentinela com a aplicação de indocianina verde (molécula altamente fluorescente) na região a ser operada. (2) O sistema de fluorescência da Indocianina Verde (ICG) é composto de um equipamento capaz de iluminar no comprimento de onda de 780nm. Este sistema possui diodos LASER com uma distribuição homogênea de luz. Para a detecção é utilizado um espelho dicróico que permite a passagem e a reflexão seletiva de luz para as câmeras equipadas com filtros que barram determinados comprimentos de onda, selecionando a região espectral para a formação da imagem. As câmeras capturam as imagens provenientes do sistema, sendo uma responsável pela aquisição de luz visível e a outra responsável pela aquisição da fluorescência da ICG. As imagens recebidas são tratadas em software desenvolvido sob a plataforma LabVIEW® gerando uma imagem sobreposta final onde é possível observar o campo visível e a região de fluorescência em destaque. Experimentos com camundongos comprovaram a aplicabilidade do equipamento. Atualmente o equipamento tem sido utilizado no Hospital de Câncer de Barretos, onde é comparado com equipamentos comerciais e mostra-se muito útil na localização de linfonodo sentinela.

Palavras-chave: Indocianina verde. Linfonodo sentinela. Fluorescência.

Referências:

1 LUCIANI, A. et al. Lymph node imaging: basic principles. **European Journal of Radiology**, v. 58, n. 3, p. 338-344, 2006.

2 FUJIWARA, M. et al. Sentinel lymphnode detection in skin cancer patients using real-time fluorescence



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

navigation with indocyanine green: preliminary experience. **Journal of Plastic, Reconstructive and Aesthetic Surgery**, v. 62, n. 10, p. e373-e378, 2009.

PG72

Study of wave-mixing processes in gases in the extreme ultraviolet spectrum with ultrashort pulses

GUALBERTO, T.¹; MISOGUTI, L.¹

tiago.gualberto.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nowaday, extreme ultraviolet and soft x-ray ultrashort laser pulses can be easily generated with use of intense femtosecond pulses. Such light source is a very promising tool to analyze matter in a more deep way, for instance, studying scattered light of proteins, crystals and other complex structures with high spatial and time resolutions at same time. One of the of the techniques available to produce such light source is the high-harmonic generation (HHG). (1) The HHG process is beyond of the usual perturbative nonlinear optics and involve giant intensities (10^{14} W/cm²), that are capable to distorts the coulomb binding potential so much that electrons can simply leak out of the atom or molecule, either by passing over the distorted binding potential or by quantum tunneling. Once freed, the electron is accelerated by the oscillating light field and then thrown again into the atomic biding field, so releasing all the energy acquired in the electromagnetic field as burst of an energetic light (EUV to x-ray). Although the HHG process using a single beam is quite well established, there are a lot of characteristics to be explored. The limitation is in that setup only odd high harmonic order could be given raised, so we are going to study the even harmonic generation through wave-mixing processes. In our setup the HHG is produced in hollow wave-guides filled by noble gases, because that technique allows a control of pressure and an easy achievement of phase-matching. (2) At the moment, we are studying the basic nonlinear properties of several gases with potential for HHG applications, more specifically, we are using a nonlinear ellipse rotation method to measure the refractive nonlinearity (n_2). (3) Measurements of n_2 at function of pulse width have been capable to distinguish the contribution of pure instantaneous electronic and other slow nonlinearities.

Palavras-chave: High harmonic generation. Ultrashort pulse. Wavemixing.

Referências:

- 1 POPMINTCHEV, T. et al. The attosecond nonlinear optics of bright coherent X-ray generation. **Nature Photonics**, v. 4, p. 822-832, 2010. doi: 10.1038/nphoton.2010.256.
- 2 DURFEE III, C. G. et al. Phase matching of high-order harmonics in hollow waveguides. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 11, p. 2187-2190, 1999.
- 3 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Accurate measurement of nonlinear ellipse rotation using a phase-sensitive method. **Physical Review Letters**, v. 22, n. 21, p. 25530-25538, 2014. doi: 10.1364/OE.22.025530.

PG73

Algoritmo online para detecção da posição de peixes elétricos

GUARIENTO, R. T.¹; PINTO, R. D.¹

rafael.tuma.guariento@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho discuto o desenvolvimento da posição da cabeça e da cauda de peixes elétricos de campo fraco da espécie *Gymnotus carapo* (1), com o intuito de correlacionar o sinal elétrico obtido por eletrodos inseridos no aquário com a sua posição. A detecção é feita utilizando o contraste do peixe, em geral escuro, com o fundo claro. Utilizei um algoritmo de limiar adaptativo por busca binária, com o vínculo dos pontos satisfazerem as dimensões esperadas do peixe, dentro das posições possíveis em que ele pode encontrar. Para detectar as posições da cabeça e da cauda, detecto inicialmente a direção em que o peixe se posiciona com relação à linha horizontal da câmera realizando PCA (Principal Component Analysis) dos pontos detectados. Então, rotaciono estes pontos de forma a ficarem sempre na mesma direção e ajusto um polinômio de ordem 3 sobre eles, que leva em conta possíveis curvaturas no formato do animal devido à sua movimentação pela água. Para diferenciar a cabeça da cauda utilizei um critério misto entre a espessura do corpo do animal com a continuidade destes pontos. Em um vídeo de teste com 10 minutos de duração e ruídos intencionais inseridos (câmera mal-posicionada de forma ao peixe ficar parcialmente fora da filmagem, apagar e acender de luzes, etc..) não foram observados erros de detecção. O vídeo pode ser visto em (2).

Palavras-chave: *Gymnotus carapo*. Processamento de Imagens. Peixes elétricos.

Referências:

1 MATIAS, P.; SLAETS, J. F. W.; PINTO, R. D. Individual discrimination of freely swimming pulse type electric fish from electrode array recordings. **Neurocomputing**, v. 153, p. 191-198, 2015. doi: 10.1016/j.neucom.2014.11.037.

2 GUARIENTO, R. T.; PINTO, R. D. **Head and tail webcam tracking of *Gymnotus carapo* fish**. Disponível em: <http://youtu.be/4DynOyNN_FI>. Acesso em 02 set. 2015.

PG74

Coupling light into doped polymeric microstructures by means of fiber tapers

HENRIQUE, F. R.¹; MENDONÇA, C. R.¹

francielerenata@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Polymeric microstructures are of great interest in many fields such as microfluidics, microelectronics, biology and especially in photonics. Two-photon polymerization is a convenient way to produce three-dimensional microstructures as it is a single step process with high resolution. (1) For their three-dimensional features, these microstructures can enable the development of three-dimensional photonic circuits. However, the polymers that are used for their manufacturing are usually optically passive elements, which means that their optical properties cannot be changed by external excitation light sources. In recent years, this polymers doping process has been studied in order to produce optically active microstructures. (2) For the incorporation of these doped structures to photonic circuits it is necessary to develop ways to connect them to external excitation sources and analysis instruments as well as connect them to each other. Optical fiber tapers are a great choice for this task as their diameter matches the size of microstructures. (3) The goal of this work is to develop the optical connection of polymeric microstructures using fiber tapers. Polymeric microstructures were produced by two-photon polymerization using a Ti:sapphire laser oscillator emitting 100 fs pulses at 800 nm with 86 MHz of repetition rate. The laser beam is focused by an objective into the unpolymerized resin. Galvanometric mirrors move the beam along the x and y axes while a translation stage moves the sample in the z axis producing three-dimensional structures. The structures were doped with different dyes like rhodamine B, disodium fluorescein and stilbene 420. The fiber tapers used to perform the optical connections were produced by a heat-and-draw approach where a conventional optical fiber is heated up until it reaches its softening temperature while a translation stage stretches the fiber symmetrically until its diameter is decreased to the desired size. Two systems were developed with the purpose of exciting the microstructures. At first, a CW laser beam was aligned to the entrance of an inverted microscope objective. In the second system, the laser beam was coupled to the conventional side of a fiber taper that had its tapered side positioned next to the microstructures by a micromanipulator. In this work we show the result of doped microstructures excitation and their emission analysis for single doped microstructures as well as for multiple doped microstructures. We could successfully connect the microstructures to excitation sources and analysis instruments. The authors would like to acknowledge FAPESP (Process: 2013/26010-2, Thematic Project: 2011/12399-0) for the financial support.

Keywords: Polymeric microstructures. Two-photon polymerization. Fiber tapers.

Referências:

1 MARUO, S.; NAKAMURA, O.; KAWATA, S.. Three-dimensional microfabrication with two-photon-absorbed photopolymerization. **Optics letters**, v. 22, n. 2, p. 132-134, 1997. doi: 10.1364/OL.22.000132.

2 OTUKA, A. J. G. et al.. Emission features of microstructures fabricated by two-photon polymerization containing three organic dyes. **Optical Materials Express** , v. 2, n. 12, p. 1803-1808, 2012. doi: 10.1364/OME.2.001803.

3 CORREA, D. S. et al. Selective excitation through tapered silica fibers of fluorescent two-photon polymerized structures. **Applied Physics A**, v. 102, n. 2, p. 435-439, 2011. doi: 10.1007/s00339-010-6165-3.

PG75

Approaching the allosteric mechanism of MosR with computational methods.

CAMARA, A.S.¹; HORJALES REBOREDO, E.¹

amanda.camara@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Allosteric proteins have a very singular capability of autoregulation. It's mediated by a large conformational change that, according to Monod's model (1), is stabilized by the binding of a molecule or some local change in the allosteric site of the protein. This site stands apart from the binding site of a second ligand related to the protein's function, for example the DNA for transcriptional regulators. Interestingly, changes in the allosteric site causes the affinity for this second ligand to vary. MosR (2) is a transcriptional regulator of *Mycobacterium tuberculosis*, the causative agent of most cases of tuberculosis. Also known as the tubercle bacillus, it lives in a very harmful environment, the interior of a phagosome in the macrophages, and it depends on several defence mechanisms. MosR is related to one of them, regulating the environmental oxidation. Under normal conditions it inhibits the expression of an oxidoreductase. But upon oxidation the affinity of MosR to its DNA site decreases, allowing the expression of the oxidoreductase to be exported. There are two cysteine residues in the allosteric site of MosR, which may form a reversible disulphide bond. Though only one of these residues is conserved on its homologous protein, we found, with computational methods, that the disulphide bond on MosR stabilizes a salt bridge holding close two α helices from two different protomers, in the same manner as the oxidized form of its homologous. In order to understand how oxidation in the allosteric site affects MosR's affinity for its DNA site we ran two molecular dynamics simulations, one for each of MosR's states, reduced and oxidized. We then filtered all but the low frequency motions, responsible for the large conformational changes associated to the biological function. To obtain these low frequency components we developed de trajectory in a series of sines terms. This method is based on the filter by Fourier transform (3), but it requires a periodical and odd function of time to be applied on. Any parameter may be filtered as a harmonic oscillation with defined frequency and amplitude. The trajectory of the protein, with 3N coordinates, may also be filtered resulting in harmonic motions similar to normal modes. The application of this method to MosR's simulations, shows the oxidation affects not only local structural aspects, but also the dynamics of the entire protein, especially the DNA binding domain. Because the ligand α helices of each binding domain must have a very specific distance and angle in between, we showed these differences in the dynamics of the molecule causes the reduced state to be more likely of binding to DNA.

Keywords: Allosterism. Low-frequency motion. Molecular dynamics simulation.

Referências:

1 MONOD, J.; WYMAN, J.; CHANGEUX, J-P. On the nature of allosteric transitions: a plausible model. **Journal of Molecular Biology**, v. 12, n. 1, p. 88-118, 1965. doi: 10.1016/S0022-2836(65)80285-6.

2 BRUGAROLAS, P.; MOVAHEDZADEH, F.; WANG,Y.; ZHANG,N.; BARTEK, I. L.; GAO, Y. N.; VOSKUIL, M. I.; FRANZBLAU, S.G.; HE, C.. The oxidation-sensing regulator (MosR) is a new redox-dependent transcription factor in mycobacterium tuberculosis. **Journal of Biological Chemistry**, v. 287, p. 37703-37712, 2012. doi: 10.1074/jbc.M112.388611.

3 SESSIONS, R. B.; DAUBER-OSGUTHORPE, P.; OSGUTHORPE, D.. Filtering molecular dynamics trajectories to reveal low-frequency collective motions: phospholipase *A2* . **Journal of Molecular Biology** , v. 210, n. 3, p. 617 - 633, 1989. doi: 10.1016/0022-2836(89)90136-8.

PG76

Non-conventional processing of $CaCu_3Ti_4O_{12}$ ceramics: Laser and Field-assisted flash sintering.

JESUS, L. M.¹; SILVA, R. S.²; M'PEKOJ.-C.¹

lilianmfisica@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de Sergipe - UFS

$CaCu_3Ti_4O_{12}$ (CCTO) has attracted great attention in literature because of its potential application in microelectronic devices, as showing very high dielectric constant (12,000) with good stability from room temperature to 300 °C. (1) In this work CCTO powder was synthesized by applying a modified polymeric precursor method. The calcined powder was conventionally sintered as well as using two non-conventional methods, namely: laser Sintering and field-assisted flash sintering. The former involves very high heating rates coupled with lower annealing time. The latter was recently introduced in literature (2), and consists of applying an electric field on the sintering body during thermal treatment, allowing production of high-density and fine-grained ceramics in a matter of seconds, at furnace temperatures well below those required in conventional sintering. The study includes analysing the physical mechanism behind each method of sintering. The dielectric responses of the ceramics showed to be strongly dependent on the processing method through the (micro)structural characteristics achieved during sintering. This complex dependence is discussed in terms of the effects expected from bulk versus grain boundaries in such materials.

Keywords: Laser sintering. Flash sintering. CCTO.

Referências:

1 SUBRAMANIAN, M. A.; LI, D.; DUAN, N.; REISNER, B. A.; SLEIGHT, A. W. High dielectric constant in $ACu_3Ti_4O_{12}$ and $ACu_3Ti_3FeO_{12}$ phases. **Journal of Solid State Chemistry**, v. 151, n. 2, p. 323-325, 2000. doi: 10.1006/jssc.2000.8703.

2 COLOGNA, M.; RASHKOVA, B.; RAJ, R. Flash sintering of nanograin zirconia in < 5 s at 850 °C. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 93, n. 11, p. 3556-3559, 2010. doi: 10.1111/j.1551-2916.2010.04089.x.

PG77

Pattern recognition framework: patterns and pseudo-randomness in complex systems

JUSTO, M. J. M.¹; BRUNO, O. M.¹

mj.machicao@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Patterns and randomness are intuitively considered two opposite terms. Pattern recognition usually involves extracting features from abstract objects in order to classify them, while computability theory and information theory explores randomness as an information measure. Besides, the slight fuzzy line between pattern & randomness, they are two terms complementary to one another, however studied separately. Considering the point of view of chaotic systems, the frontier between regularity and randomness, involving these two terms together can be of high importance to study complex systems. Classical pattern recognition is a field based on decision theory, artificial intelligence, evolutionary computation and fuzzy logic. However, this field still presents many challenges and limitations when applied into complex systems problems. Recently, the field of chaos theory offered their tools to the pattern recognition (1) and cryptography (2), thus opening new branches of research. We proposed a pattern recognition framework to search for patterns and pseudo-randomness on complex systems. This work has focused on different complex systems such as one-dimensional dynamical systems, complex networks, cellular automata (CA), and their combinations. Thus, several methods derived from interdisciplinary tools (graph theory, chaos and complexity theory) were implemented aiming to analyze patterns & randomness on complex systems from different perspectives. During this PhD, four applications of pattern recognition (patterns & randomness) on complex systems from fields of Cryptography, Biology and Literature were analyzed. The first application was to explore the pseudo-randomness of one-dimensional dynamical systems by means of the Lyapunov exponent, from chaos theory. Thus, the well-known Logistic map was explored by removing k digits from the original orbital sequences, which we called k -logistic map. In the meantime, some initial results showed an increase of pseudo-randomness when high k values are setup, which is of interest to Cryptography. A second application of pattern recognition was applied to CA, which represents a discrete branch of chaos theory. Thus, it was proposed a prototype of CA combined with complex networks, where cells represent nodes and their dynamic is dependent on its neighborhood and their transition function. This second application allowed extracting patterns using metrics such as entropy, word-entropy and Lempel Ziv complexity, permitting the classification of various network types. A third approach of pattern recognition was applied to plant metabolic networks, which are intrinsically considered as complex systems because of their scale-free behavior. In this scenario, several topological metrics from graph theory extracted phylogenetic patterns that may trace evolutionary information. It is also expected to explore other metrics within these complex systems. A fourth application was applied in authorship recognition. A database of complex networks (3) made up from the frequency that words appear into literary text were modeled as chaotic systems, in this manner, the Lyapunov exponent calculated over these database extracted authorship patterns. Finally, the successful preliminary results obtained, until now, indicate that the proposed framework of various methods based on chaos theory, complex networks and complexity theory can bring good results for the field of pattern recognition.

Keywords: Pattern recognition. Patterns and randomness. Complex systems.

Referências:

- 1 FLORINDO, J. B. et al. Brachiaria species identification using imaging techniques based on fractal descriptors. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 103, p. 48-54, 2014. doi: 10.1016/j.compag.2014.02.005.
- 2 MACHICAO, J. et al. A dynamical systems approach to the discrimination of the modes of operation of cryptographic systems. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, v. 29, n. 1-3, p. 102-115, 2015.
- 3 AMANCIO, D. R. et al. Comparing intermittency and network measurements of words and their dependence on authorship. **New Journal of Physics**, v. 13, n. 12, p. 123024-1-123024-17, 2011.

PG78

Discovery and development of a cosmetic active for skin oil control

KATEKAWA, E.¹; GUIDO, R. V. C.¹

katekawa@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Cosmetics are defined as products intended to be applied to the human body for cleansing, beautifying, promoting attractiveness, or altering the appearance without affecting the body's structure or functions. (1) Currently, the development of a new active compound as cosmetic requires scientific investigation and massive investments. The scarcity of safe, effective (2), and the social and economical impact related to acne prompt the discovery of new compounds as sebum-regulating agents for cosmetic purposes. (3) Therefore, the main goal of this work is the discovery and development of a new, safe and effective cosmetic active ingredient capable of reducing excessive skin brightness and assist acne treatment. In this work, we employed an integrated approach including *in silico* and *in vitro* studies for the prospection of biologically active substances. The selected molecular target has been highly associated to sebogenesis. In addition, it was shown the modulation of the target activity by small molecules reduce the amount of sebum within cells. The strategy to discover new sebum-regulating agents includes homology modeling of the molecular target, virtual screening campaign and selection of candidates for *in vitro* evaluation. A model of the target was constructed on the basis of homology modeling using nociceptin receptor as template. The model was validated and used to screen the drug-like subset of the ChEMBL database. A combination of visual inspection and scoring function was employed to select the small molecules virtual candidates. The development of a robust structural model is crucial to the application of structure-based drug design strategies aiming at the discovery of new bioactive compounds. The selected receptor is an attractive molecular target for medicinal chemistry efforts aimed at developing new sebum-regulating agents for acne control.

Palavras-chave: Sebum. Acne. Skin.

Referências:

- 1 U.S. FOOD AND DRUG ADMINISTRATION. **Federal food, drug, and cosmetic act (FD&C Act)**. Disponível em: <<http://www.fda.gov/RegulatoryInformation/Legislation/FederalFoodDrugandCosmeticActFDCAAct/FDCAActChapterIXTobaccoProducts/default.htm>>. Acesso em: 01 set. 2015.
- 2 OUDENHOVEN, M.D. et al.. Adverse effects of acne medications: recognition and management. **American Journal of Clinical Dermatology**, v. 16, n. 4, p. 231-242, 2015. doi: 10.1007/s40257-015-0127-7.
- 3 HAY, R.J. et al. The global burden of skin disease in 2010: an analysis of the prevalence and impact



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

of skin conditions. **Journal of investigative Dermatology**, v. 134, n. 6, p. 1257-1534, 2014. doi: 10.1038/jid.2013.446.

PG79

Estudos sobre o limite de detecção em amostras de solo amazônico por LIBS sob aspecto de diferentes comprimentos de onda

KRUGER, A. L.¹; NICLODELLI, G.²; MILORI, D. M. P. B.²

annelk1@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

A espectroscopia de emissão óptica com plasma induzido, conhecida também pela sigla LIBS (*Laser Induced Breakdown Spectroscopy*) é uma técnica versátil, de simples implementação e com possibilidade de ser usada in situ. A fim de adquirir melhores resultados e ter maior controle no LIBS, é importante definir adequadamente os parâmetros envolvidos, sendo um dos mais importantes o comprimento de onda. (1) Este parâmetro tem grande influência na formação do plasma, portanto na forma final dos espectros obtidos, e consequentemente no limite de detecção (LOD) para cada elemento a ser analisado. Neste trabalho serão apresentados os resultados obtidos para o LOD nos elementos ferro (Fe) e carbono (C) em 5 amostras de solo amazônico. O intuito de se realizar as medidas com diferentes comprimentos de onda é analisar a correlação e o LOD em relação a estas, para buscar assim uma melhor otimização do sistema e estudar as possíveis vantagens de se usar um em particular para uma determinada medida LIBS. Para estudar o solo amazônico se utilizaram 5 amostras distintas, retiradas em locais diferentes da região. Foram feitas pastilhas de solo com 1 cm de diâmetro, nas quais foi utilizado o LIBS. O sistema no qual o estudo foi realizado é composto por dois lasers de Nd:YAG centrados em 532 e 1064nm, e um espectrômetro de alta resolução com fibras ópticas (ARYELLE 400-Butterfly). A densidade de energia em cada laser foi mantida a mesma. Para cada amostra obteve-se 10 espectros com cada um dos comprimentos de onda. A análise foi realizada ajustando uma função lorentziana em cada pico estudado para obter a área do pico em cada espectro. O LOD determina o valor mínimo de concentração necessário para se detectar um determinado elemento na amostra. (2) Ele é definido por $3\sigma/s$ onde σ é o desvio padrão do branco e s é o coeficiente angular de calibração, é calculado para ambos os elementos, e foi menor ao utilizar o laser de 532 nm, o que mostra que a menor comprimento de onda há maior probabilidade de se detectar o elemento analisado (neste caso Fe e C).

Palavras-chave: LIBS. LOD. Solo amazônico.

Referências:

1 FORNARINI, L.; SPIZZICHINO, V.; COLAO, F.; FANTONI, R.; LAZIC, V. Influence of laser wavelength on LIBS diagnostics applied to the analysis of ancient bronzes. **Analytical and Bioanalytical Chemistry**, v. 385, n. 2, p. 272-280, 2006. doi: 10.1007/s00216-006-0300-1.

2 JANTZI, S. C.; ALMIRALL, J. R. Characterization and forensic analysis of soil samples using laser-induced



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

breakdown spectroscopy (LIBS). **Analytical and Bioanalytical Chemistry**, v. 400, n. 10, p. 3341-3351, 2011. doi: 10.1007/s00216-011-4869-7.

PG80

Dissecting the interactions of human galectin-4 and carbohydrates

KUMAGAI, P. S.¹; NONATO, M. C.²; DIAS-BARUFFI, M.²; COSTA-FILHO, A. J.³

patriciasuemy@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - USP

³Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

Galectins are members of the lectin family that is characterized by its affinity for beta-galactosides and homologous carbohydrate recognition domains (CRDs). They are widely distributed in normal and neoplastic cells of different organisms and are involved in a great diversity of cellular mechanisms such as interactions with cell-surface glycans, cell adhesion and apoptosis. The malfunction of galectins is associated with tumor progression and human carcinogenesis, which has turned galectins into a very promising tool for cancer diagnosis and/or treatment. Human galectin-4 (HGal-4) is a 36 kDa monomer consisting of two carbohydrate recognition domains (CRD-I and CRD-II) connected by a peptide linker. The mechanisms in which galectin-4 is involved often require carbohydrate recognition on the cell surface. However, the specific details regarding those mechanisms, the molecular determinants of the interaction and the importance of different specificity of each domain and the HGal-4 are still unclear. In this study, we performed spectroscopic (Fluorescence, CD and SRCD) analyses on each domain separately and on the whole HGal-4 taking into account the carbohydrate specificity and structural changes. Further, microscale thermophoresis (MST), a new method to quantify bimolecular interaction, and isothermal titration calorimetry (ITC) were performed to determine ligand-protein binding constant. The proteins were expressed and purified using previously described protocols (1-2). SRCD were collected at ANKA-KIT (Karlsruhe, Germany) and MST at University of Oxford (Oxford, UK). Circular dichroism experiments were used to monitor the thermal stability of the proteins in the absence and in the presence of several carbohydrates. Although very high similarities of CRD structures, SRCD spectra showed differences in its secondary structure. Therefore, CD spectra indicated that the presence of carbohydrates does not alter the protein structure, although increasing its thermal stability. Since a tryptophan residue is involved in lactose binding, the change in its intrinsic fluorescence could indicate the galectin ligand-binding assays. Upon the addition of lactose, the fluorescence maxima shifted to a shorter wavelength. And, from ITC and MST we could determine the dissociation constant of HGal-4 to lactose ($k_d = 11 \pm 2$ mM) and to N-acetyl-Lactosamine ($k_d = 1 \pm 0.1$ mM). All these findings suggested that each domain responds differently depending on the sugar and, consequently, their specificities are distinct. SRCD could provide small differences in secondary structure that conventional CD could not access. The values of k_d determined with MST are consistent with k_d of other galectins. Further, the specificity of human galectin-4 with LacNAc indicates higher affinities for longer chain carbohydrates.

Keywords: Galectin. Interactions. Spectroscopy.

Referências:

1 ZIMBARDI, A. et al. Cloning, expression, purification, crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of the N-terminal carbohydrate-recognition domain of human galectin-4. **Acta Crystallographica F**, v. 66, p. 542-545, 2010. doi: 10.1107/S1744309110010778.

2 IDEO, H. et al.. High-affinity binding of recombinant human galectin-4 to SO(3)(-)->3Galbeta1->3GalNAc pyranoside. **Glycobiology**, v. 12, n. 3, p. 199-208, 2002. doi: 10.1093/glycob/12.3.199.

PG81

Astroparticle tests of Lorentz invariance violation

LANG, R. G.¹; SOUZA, V, de¹

rodrigo.lang@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Relativity is one of the most important theories of modern physics and one of its pillars is the Lorentz invariance, which is proposed to be a fundamental symmetry. However, the possibility of Lorentz invariance violation (LIV) has been proposed by different quantum gravity models (string theory, warped brane worlds and loop quantum gravity for example) and is incorporated in non-commutative field theory, emergent gauge bosons, axion-Wess-Zumino models, varying speed of light cosmologies and others. Testing Lorentz invariance is, therefore, very relevant for theoretical physics. Over the last years, different experiments were performed to test it, both terrestrial (such as penning traps, spin polarized torsion balances and doppler shift of lithium) and astrophysical (such as time of flight, interaction threshold and phase coherence of light). (1) Nevertheless, there is a difference in the scale of energy of these experiments. While terrestrial accelerators can reach about $10^{12}eV$, the Pierre Auger Observatory has detected events at $10^{20}eV$. (2) Thus, astrophysical observations are a suitable option for testing LIV since its effects are suppressed in low energies. In this work, we study two astrophysical tests: interaction threshold and time of flight. In the first, a small first order perturbation in the free particle Lagrangian is proposed, which results in a new term in the dispersion relation that depends on the particle momentum. Due to that term, the kinematics of propagation interactions are modified: the phase space allowed for photopion production is reduced and vacuum Cherenkov threshold becomes finite. Propagating ultra-high energy cosmic rays (UHECR) are affected by these modifications and, therefore, the flux of UHECR is modified. (3) We calculated analytically how different features of the flux are modified by different terms of LIV. The results were then compared to the UHECR flux measured by the Pierre Auger Observatory, the most notorious UHECR experiment, with an area of $3000km^2$. The main effects observed so far on the flux are the shift of the GZK suppression and a recovery of the spectrum at higher energies. We expect at the end of this study to impose upper limits of the LIV factors and also to study the modification in the pair production kinematics, which will have second order effects on the spectrum when compared to photopion production. The second test is based on differences on the time of flight of photons. A modified dispersion relation might lead to a dependence of the energy on the photon velocity. The differences would be small, however, extragalactical photons travel a long distance from the source to Earth. Therefore, two photons emitted at the same time in an extragalactical source could be detected at different times. The Cherenkon Telescope Array (CTA) is a collaboration to build a new generation gamma-ray observatory that will be able to detect a flux 10 times weaker than any working observatory and, thus, has an incredible potential to test this effect. In this work we also expect to study through simulations possible measurements of time of flight differences with the CTA.

Keywords: Lorentz invariance violation. Pierre Auger. CTA.

Referências:

- 1 MATTINGLY, D.. Modern tests of Lorentz invariance. **Living Reviews in Relativity**, v. 8, p. 5, 2005. doi: 10.12942/lrr-2005-5.
- 2 VALDIÑO, I. The flux of ultra-high energy cosmic rays after ten years of operation of the Pierre Auger Observatory. In: INTERNATIONAL COSMIC RAY CONFERENCE, 34, ICRC, 2015, The Hague, Netherlands. **Proceedings...** The Hague, Netherlands: ICRC, 2015.
- 3 SCULLY, S. T.; STECKER, F. W.. Lorentz invariance violation and the observed spectrum of ultrahigh energy cosmic rays. **Astroparticle Physics**, v. 31, n. 3, p. 220-225, 2009.

PG82

Interação não canônica entre septinas: os complexos de SEPT3 (grupo I) e septinas do grupo II

LANZONI, P.¹; GARRATT, R. C.¹

paola_lanzoni@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As septinas compõem o 4º componente do citoesqueleto das células eucarióticas. São proteínas filamentosas que se arranjam em forma de fibras e anéis, desempenhando um papel estrutural na célula. Além disso, as septinas estão intimamente ligadas a doenças como Mal de Alzheimer, esterilidade masculina e alguns tipos de tumores. Os seres humanos expressam 13 tipos de septinas e são divididas em 4 grupos, que são classificados pela sua posição em um filamento canônico: Grupo I (SEPT3, SEPT9, SEPT12); Grupo II (SEPT6, SEPT8, SEPT10, SEPT11, SEPT14); Grupo III (SEPT1, SEPT2, SEPT4, SEPT5) e Grupo IV (SEPT7). O primeiro filamento fisiológico foi o SEPT2-SEPT6-SEPT7, isolado por Makoto Kinoshita e serve como a base para a formação de filamentos canônicos onde se sugere que septinas do mesmo grupo ocupam o mesmo lugar no filamento. (1) Sabemos ainda que SEPT7 é indispensável para a formação dos filamentos de septinas e ainda que SEPT9 ocupa uma posição terminal nos filamentos de septinas. Entretanto, estudos conduzidos por Nakahira e Macedo e colegas (2) mostraram através de ensaios de duplo-híbrido que existem outras possibilidades para as interações entre septinas como SEPT9-SEPT6 e SEPT9-SEPT8, sugerindo que interações não canônicas também possam ocorrer in vivo. Além deste, estudos conduzidos por outros grupos mostraram a existência da interação entre septinas do Grupo I interagem com septinas do Grupo II e ainda, Ding e colegas (3) mostraram que no caso SEPT11-SEPT12 a interação deixa de existir ao fazer uma mutação sítio-dirigida na interface G destas proteínas. O presente trabalho analisa a interação entre SEPT3, uma septina do Grupo I, com todas as septinas do Grupo II. A princípio, esta interação foi estudada através de análises de copurificação em resina de afinidade onde SEPT3 possuía uma extensão de 6xHis pela expressão no MCS1 do pETDuet-1 e o sítio MCS2 era preenchido pelas septinas do Grupo II. Esta primeira análise mostrou que apesar de existente a interação, SEPT3 não é copurificada com todos os membros do Grupo II dando uma clara evidência de variação de afinidade entre eles. Para os complexos verificados com sucesso através desta primeira etapa copurificação, uma segunda etapa de purificação foi realizada através da Superdex 200 16/60 XK, quando verificamos o estado oligomérico deste complexo. Para uma análise quantitativa, os componentes foram expressos sozinhos e então uma mistura equimolar foi utilizada para verificar seu KD por termoforese, atualmente estamos realizando experimentos de ultracentrifugação analítica e ressonância plasmônica de superfície para fins de validação dos resultados já encontrados além de tentativas de cristalização do complexo. Resultados preliminares mostram que SEPT3 realiza interação com SEPT6, SEPT8 e SEPT11, porém, em diferentes formas: SEPT3-SEPT6 apenas são eluídos como agregado na exclusão molecular enquanto SEPT3-SEPT8 e SEPT3-SEPT11 mostram-se como dímeros promissores. Uma medida quantitativa da interação entre SEPT3-SEPT8 mostrou um KD de 20 uM através de termoforese. Novos experimentos para a quantificação destas interações estão sendo conduzidos.

Palavras-chave: SEPT3. Interação proteína-proteína. Constante de dissociação.

Referências:

- 1 KINOSHITA, M. Assembly of mammalian septins. **Journal of Biochemistry**, v. 134, n. 4, p. 491-496, 2003. doi: 10.1093/jb/mvg182.
- 2 NAKAHIRA, M. et al. A draft of the human septin interactome. **Plos One**, v. 5, n. 11, p. e13799-1-e13799-12, 2010. doi: 10.1371/journal.pone.0013799.
- 3 DING, X. et al. GTP binding is required for SEPT12 to form filaments and to interact with SEPT11. **Molecules and Cells**, v. 25, n. 3, p. 385-389, 2008.

PG83

Experimentos históricos no ensino de ciências - Ole Roemer e a velocidade da luz

LAPORTE, R. S.¹; SILVA, C. C.¹

rafael.laporte@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Durante os últimos anos, o uso e a reprodução de experimentos históricos tem se tornado objeto de estudo e pesquisa no contexto de educação científica. (1) Desde os gregos antigos, sempre existiram ideias controversas sobre a velocidade da luz e sua finitude. Durante o século XVII, filósofos e astrônomos como Descartes, Galileo, Cassini e Huygens se envolveram com a questão. Em 1676, Ole Roemer previu que o eclipse do satélite da lua Io de Júpiter iria ocorrer exatamente dez minutos depois do tempo computado baseado em eclipses anteriores. A confirmação desta previsão é considerada como evidência irrefutável a favor da finitude da velocidade da luz. (2) Este trabalho apresenta uma sequência didática visando explorar o debate referente a finitude da velocidade da luz. As atividades serão direcionadas a estudantes de graduação em física e em ensino de ciências. A sequência didática inclui uma contextualização histórica do episódio através do estudo de fontes secundárias, da leitura de trechos de fontes primárias das pessoas envolvidas no debate, da reprodução das medidas de Ole Roemer em um observatório astronômico didático e do uso de softwares que simulam o céu. Além do conteúdo básicos em astronomia, a sequência didática também incluirá objetivos como analisar a relação entre o desenvolvimento teórico e o processo experimental de um fenômeno estudado, a precisão das medidas (3), a aceitação de novos métodos experimentais e como cientistas reagem quando tem suas ideias confrontadas.

Palavras-chave: Experimentos históricos no ensino de ciências. Velocidade da luz. Ole Roemer.

Referências:

- 1 HEERING P.; WITTJE R. Learning by doing: experiments and instruments in the history of science teaching. **Science & Education**, v. 21, p. 1375-1380, 2012.
- 2 COHEN, I. B. **Roemer and the first determination of the velocity of the light**. New York: Burndy Library, 1944. 14-57 p.
- 3 SHEA, J. H. Ole Roemer, the speed of light, the apparent period of Io, the Doppler effect, and the dynamics of earth and jupiter. **American Journal of Physics**, v. 66, n. 7, p. 561-569, 1998.

PG84

Estudos de otimização de sinergismo entre enzimas hidrolíticas e oxidativas de diversas origens fúngicas para a preparação de coquetéis enzimáticos

LEITE, A. E. T.¹; GODOY, M. O.¹; KADOWAKI, M. A. S.¹; POLIKARPOV, I.¹; AZEVEDO, E. R.¹

anatognoli@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A busca por fontes renováveis de energia tem crescido muito, levando à necessidade de buscar novas formas de produção a partir de materiais renováveis. Um desses materiais é a biomassa rica em celulose. Este homopolímero é formado por cadeias lineares não ramificadas de resíduos de glicose unidos por ligação beta 1 4 e pode estar presente na forma amorfa ou cristalina. (1) Quando na forma cristalina, apresenta recalcitrância à hidrólise, devido a saturação de suas ligações de hidrogênio. A hidrólise convencional da biomassa inicia-se por um pré-tratamento químico, físico ou biológico que resulta na remoção de uma fração significativa de hemiceluloses e lignina além da diminuição da cristalinidade da celulose. Este processo facilita assim a atuação de enzimas hidrolíticas e oxidativas. Neste contexto busca-se o melhoramento das enzimas que realizam a hidrólise da biomassa através da produção de coquetéis enzimáticos. Esses preparados apresentam celulasas de diferentes classes como as endoglucanases que clivam ligação beta 1 4 glicosídicas, as celobiohidrolases que clivam as extremidades redutoras e não redutoras formando resíduos de celobiose e as beta glicosídates que quebram a ligação entre as unidades de glicose da celobiose, além de enzimas acessórias como as oxidoredutases. (2) O resultado da ação enzimática é a formação de resíduos de glicose a serem posteriormente fermentados para a produção de etanol de segunda geração. Desta forma, o presente trabalho tem como objetivo a expressão heteróloga de monocomponentes enzimáticos de origem fúngica para elaboração de coquetel enzimático com potencial aplicação biotecnológica. Enzimas de diferentes classes de glicosil hidrolases (GH) e oxidativas (AA) serão obtidas por expressão heteróloga no fungo *Aspergillus nidulans* (A773) em cultura estática, utilizando maltose como indutor. As proteínas recombinantes secretadas serão concentradas e purificadas através de técnicas cromatográficas. As atividades hidrolíticas e oxidativas dessas enzimas serão avaliadas em separado quanto às condições ótimas de pH e temperatura e de forma sinérgica variando-se a proporção relativa e substrato. Temos como perspectivas futuras que essas diferentes classes de enzimas GH e AA purificadas, não degradadas e que ainda apresentem uma boa capacidade de hidrolisar a celulose. Esperamos principalmente que consigamos encontrar uma condição (pH, temperatura, indutor, entre outros fatores) em que ocorra um excelente sinergismo entre essas classes de enzima, que a capacidade hidrolítica dessa mistura seja melhor que a soma dessas enzimas separadamente, tendo assim atingido o objetivo do trabalho e sendo assim possível melhorar a produção de biocombustíveis através da elaboração de um coquetel enzimático mais eficiente.

Palavras-chave: Celulasas. Purificação. Sinergismo.

Referências:

1 MULINARI, E. J. **Expressão heteróloga em *Aspergillus nidulans* e caracterização bioquímica e estrutural de uma endoglucanase de *Aspergillus terreus***. 2015. 135p. Tese (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

2 BOTTOLAZZO, N. G. **Isolamento e seleção de fungos celulolíticos para hidrólise enzimática do bagaço da cana de açúcar**. 2011. 77p. Tese (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2011.

PG85

Optimization of photosensitizer delivery with nanostructures

LEITE, I. S.¹; ZUCOLOTTO, V.¹; BAGNATO, V. S.¹; INADA, N. M.¹

ilaiali.leite@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Cancer is a designation attributed to not one but several diseases that present loss of control over cellular division by a specific type of cell. Without it, the affected cells disorderly proliferate and may overspread surrounding tissue, occasionally in an aggressive manner. (1) According to the World Health Organization, the leading cause of mortality and morbidity worldwide is cancer, with 2012 data reporting 14 million new cases and 8.2 million deaths related to these diseases. (2) Treatment efficacy is limited to several factors, for instance impossibility to surgically remove the affected tissue (due to localization or extent of the tumor) or permanence of cancer cells after surgery. Consequently there is a necessity of developing new approaches to treat cancer or optimize the current available treatments. One technique that was initially introduced for cancer treatment but currently is applied to infections and other diseases is photodynamic therapy. (3) It consists on the action of a photoactive substance, called photosensitizer, molecular oxygen at treatment site and light with a specific wavelength, capable of interacting with the photosensitizer. The interaction of these three elements produce singlet oxygen and reactive oxygen species, which are capable to cause oxidative damage to cell membrane, organelles, etc. resulting in cell death. Nevertheless photodynamic therapy efficiency depends on the photosensitizer buildup at treatment site, and the predicament of active substance delivery isn't a photodynamic therapy exclusive issue, representing a fundamental problem for drugs development. An alternative that has been employed since the 60's is nanotechnology, which can be defined as the comprehension and control of matter in dimensions between 1 and 100 nanometers, where unique phenomena allow the development of new applications. Different nanosystems, e. g. nanoparticles, liposomes and micelles, can be employed to optimize drug delivery through enhancement of the substance's circulation half-life, modification of its biodistribution profile and prevention of its degradation and excretion by the organism. The preferential and specific drug buildup at the therapeutic site also promotes toxicity reduction. The combination of photodynamic therapy's oxidative damage to promote cell death with the nanotechnology's specificity and the permeation through cell membrane enhancement may optimize cancer treatment. . The aim of this project is to produce nanoencapsulated photosensitizers, such as porphyrins and cyanines, and evaluate mechanisms of cell death in *in vitro* cultures of prostate cancer. After nanoparticles assembly, to obtain its impact on the cells metabolism the colorimetric MTT assay will be performed. The optimal condition will be evaluated with flow cytometry to quantify the culture's viability, necrotic/apoptotic cell death, reactive oxygen species production and cytosolic calcium. To assess the nanosystem absorption, photosensitizer liberation and localization inside the cells, confocal microscopy will be used.

Keywords: Photodynamic therapy. Nanotechnology. Cancer.

Referências:

- 1 HANAHAN, D.; WEINBERG, R. A. The hallmarks of cancer. **Cell**, v. 100, n. 1, p. 57-70, 2000.
- 2 WORLD HEALTH ORGANIZATION. Cancer. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs297/en/>>. Acesso em: 20 maio 2015.
- 3 HUANG, Z. A review of progress in clinical photodynamic therapy. **Technology in Cancer Research & Treatment**, v. 4, n. 3, p. 283-293, 2005.

PG86

Especificidade na montagem de filamentos de Septinas: o caso da interface G entre SEPT5 e SEPT8

LEONARDO, D. A.¹; LANZONI, P.¹; MACEDO, J. N.¹; CRUSCA, E. J.²; GARRATT, R. C.¹

diego.leonardo326@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Septinas são GTPases importantes para a manutenção da estrutura da célula estando envolvidas em muitos processos biológicos. Nos humanos, as 13 septinas expressas foram divididas em quatro grupos baseados na sequência de aminoácidos, observando-se três domínios: um N-terminal que apresenta uma sequência polibásica, o domínio conservado de ligação ao nucleotídeo (G) e o C-terminal. Um fator determinante para sua função é a polimerização de septinas individuais formando filamentos. A formação dos filamentos é mediada por duas interfaces: a interface G, através do domínio G de duas septinas, e a interface NC envolvendo os domínios N e C terminal. O único filamento caracterizado fisiologicamente e estruturalmente é o formado pela unidade básica de SEPT7-SEPT6-SEPT2-SEPT2-SEPT6-SEPT7 (1), onde elas podem ser substituídas por outras do mesmo grupo no filamento (ex. SEPT2 por SEPT5). Os determinantes estruturais da montagem correta do filamento são pouco conhecidos, sendo o estudo limitado pela complexidade de purificar e cristalizar complexos de trímeros ou tetrâmeros. Uma abordagem simplificada é estudar interfaces individuais de um filamento (G e/ou NC) por separado. (2) O objetivo deste projeto de mestrado é caracterizar estruturalmente a interface G formada por SEPT5 e SEPT8. Para o estudo proposto, os genes de SEPT5 (NGC) e SEPT8 (NGC) foram clonados no vetor pRSF-Duet e os domínios GTPase das duas septinas no vetor pET-Duet. Cada construção foi subsequentemente co-expressa e purificada por cromatografia de afinidade para comprovar a interação entre elas. A análise do estado oligomérico foi feita por cromatografia de exclusão de tamanho (SEC). Com fim de confirmar a identidade das duas proteínas, análises de espectrometria de massa foram feitas para as duas construções purificadas. Ensaios iniciais de cristalização foram feitos para ambos complexos. Na ausência de uma estrutura cristalográfica, um modelo do complexo SEPT5-SEPT8 foi feito usando o programa Modeller e validados com o SAVE Server. O complexo SEPT5-SEPT8 foi co-expresso e co-purificado por cromatografia de afinidade com sucesso e analisado por SDS-PAGE. As massas estimadas para ambos complexos quando purificados por SEC mostra aproximadamente um tetrâmero, a estequiometria do complexo purificado foi avaliada por SDS-PAGE. As bandas observadas foram tratadas com tripsina e analisadas num espectrofotômetro de massas identificando, para ambos complexos, tanto SEPT5 e SEPT8. Cristais do complexo SEPT5-SEPT8 GTPase foram obtidos e difratados no sincrotron Diamond Light Source (Oxford, Inglaterra), mas os dados obtidos foram insuficientes para análise. O modelo SEPT5-SEPT8 foi analisado usando só aminoácidos conservados para seus respectivos grupos, identificando uma interação específica entre Thr19 de SEPT8 e Phe131 de SEPT5. Mutações para aqueles aminoácidos foram feitas no complexo SEPT5-SEPT8 NGC. Os resultados mostram a interação entre SEPT5 e SEPT8 formando um complexo aproximadamente equimolar quando são purificadas. Além disso, os resultados de bioinformática sugerem que Thr19 e Phe131 podem ser críticos para a

determinação da especificidade da interface G e, assim, em parte, responsável por controlar a montagem correta do filamento.

Palavras-chave: Citocinese. GTPase. Interação proteína-proteína.

Referências:

1 SIRAJUDDIN, M. et al. Structural insight into filament formation by mammalian septins . **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007. doi: 10.1038/nature06052.

2 MARTÍNEZ, C. et al. Human septin-septin interactions as a prerequisite for targeting septin complexes in the cytosol. **Biochemical Journal**, v. 382, n. 3, p. 783-791, 2004. doi: 10.1042/BJ20040372.

PG87

Functional characterization of *Trypanosoma brucei* spliceosomal protein U5-15K

LIMA, A. L.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹

ana.lima@hotmail.com

¹Instituto de Física da São Carlos - USP

The majority of eukaryotic genes contain exons and introns in their structure. The introns need to be removed in order to form a mature messenger RNA (mRNA), this processing is called splicing and it can happen in two different ways: cis splicing, there is only one mRNA molecule from where the introns are removed, and trans splicing, that involves the binding of two different transcripts to form the mature mRNA. (1) The *trypanosomatidae* family comprehends several etymological agents of human diseases such as Sleeping sickness (*Trypanosoma brucei*), Chagas disease (*Trypanosoma cruzi*) and Leishmaniosis (*Leishmania spp*). Trans splicing is a highly conserved biochemical pathway in these parasites wherein all mature messengers are initialized by the same 40 nucleotides sequence called splice leader (SL) and require ribonucleoproteins (U1, U2, U4/U6 e U5 snRNPs) complexes formed by small RNAs rich in uridine strongly bound to proteins. (2) U515k is a highly conserved protein in eukaryotes and experiments performed with *S. cerevisiae*, *S. pombe* and *T. brucei* showed that this protein is essential in trans splicing as well as cell viability. U515k strongly interacts with another U5 protein, U5102k, which has an important role on the U4/U6.U5 trisnRNP formation. (3) Previous studies showed that *T. brucei* U515k possesses a self cleavage activity, where a cysteine residue may be responsible, and small angle x ray scattering (SAXS) and homology modelling showed the presence of a flexible region that may be preventing crystal formation. The scope of this project is the functional characterization of U515k using the expression of protein mutants in vivo through PTPtag as well as crystallization tests with the mutated U515k, without the flexible region, and U515k bonded to U5102K. These two proteins were cloned in pETduet and an expression test was performed using BL21(DE3) strain, to improve expression, other *E. coli* strains will be tested. For the functional study a site directed mutagenesis is being performed aiming the substitution of the cysteine residue for an alanine. This mutation will be used for in vivo functional characterization and to perform new cleavage tests.

Keywords: U5-15K. Trans-splicing. *Trypanosoma brucei*.

Referências:

1 MAYER, M. G.; FLOETER-WINTER, L. M. Pre-mRNA trans-splicing: from kinetoplastids to mammals, an easy language for life diversity. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 100, n. 5, p. 501-501, 2005.

2 ULLU, E.; TSCHUDI, C. Accurate modification of the Trypanosome spliced leader cap structure in a homologous cell-free system. **Journal of Biological Chemistry**, v. 270, n. 35, p. 20365-20369, 1995.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

3 DA SILVA, M. T. A.; AMBRÓSIO, D. L.; TREVELIN, C. C.; WATANABE, T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; VALENTINI, S. L.; CICARELLI, R. M. B. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, 2011.

PG88

Estudos estruturais e cinéticos de enzimas alvo de *Xanthomonas albilineans* para o desenvolvimento de novos candidatos a agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar

LIMA, G.M.A.¹; GUIDO, R.V.C.¹

gustavo.alvares.lima@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A matriz energética brasileira é marcada pela alta utilização de fontes renováveis como os biocombustíveis. (1) O sucesso dos biocombustíveis no Brasil, em especial o etanol de cana-de-açúcar, está diretamente relacionado ao impacto econômico da produtividade canaviais. (2) O combate a fatores que diminuem a qualidade energética da cana-de-açúcar é uma medida essencial, com destaque para as fitopatologias que acometem a lavoura. A escaldadura-das-folhas é uma fitopatia causada pela bactéria gram-negativa *Xanthomonas albilineans*, sendo encontrada em praticamente todas as regiões do mundo onde a planta é cultivada. A necessidade de reforma precoce no canavial e perda de produtividade pela diminuição da qualidade do caldo extraído da planta, associadas à ausência completa de prevenção ou tratamento à fitopatia, reforçam a importância da busca de novas moléculas candidatas a agroquímicos. (3) Neste trabalho, a identificação, clonagem, expressão e purificação de duas enzimas, XaDHNA (Di-hidropterina aldolase) e XaHPPK (Hidroximetildi-hidropteridina pirofosfoquinase) da via biossintética de folatos, essencial para o patógeno, possibilitou estudos estruturais e cinéticos dos alvos moleculares. As sequências codificadoras para as enzimas XaHPPK e XaDHNA foram clonadas com sucesso e permitiu a obtenção das enzimas na forma solúvel. Em seguida, um protocolo de purificação eficiente foi desenvolvido para o isolamento dos alvos moleculares em quantidades adequadas para os experimentos de cristalização. Os ensaios de cristalização indicaram que cristais promissores de XaHPPK foram obtidos na condição 200 mM MgCl₂, 100 mM Tris-HCl, 20% PEG 3350, pH 8,0. A XaHPPK pura foi utilizada para a determinação do parâmetro cinético K_D aparente para o substrato 6HPMH2 (6-hidroximetil-7,8-di-hidropterina) $K_D = 97 \mu\text{M}$ por meio da técnica de DSF (do inglês, *Differential Scanning Fluorimetry*). Para a enzima XaDHNA, estudos de cristalização e caracterização cinética encontram-se em andamento. Paralelamente à estratégia de biologia molecular estrutural, foram realizados ensaios fenotípicos frente à cultura de *X. albilineans* utilizando uma coleção de compostos tanto de origem sintética quanto natural, adquiridos por meio de colaborações. A capacidade de inibição do crescimento de *X. albilineans* de 83 compostos foi avaliada em ensaios de triagem biológica, entre eles, 2 compostos derivados de nitrofurano apresentaram atividade inibitória de ordem micromolar.

Palavras-chave: Agroquímicos. Química medicinal. Cana-de-açúcar.

Referências:

1 CENTRO DE GESTÃO E ESTUDOS ESTRATÉGICOS. Bioetanol combustível: uma oportunidade para o Brasil. Brasília, DF: CGEE, 2009.

2 CHRISTODOULOU, P. et al. The sustainability of beet sugar production in comparison with other sugar crops. In: EUROPEAN SOCIETY FOR SUGAR TECHNOLOGY CONFERENCE, ESST, 2009, Rotterdam, The Netherlands. **Proceedings...** Rotterdam: ESST, 2009.

3 BIRCH, R. G.. *Xanthomonas albilineans* and the antipathogenesis approach to disease control. **Molecular Plant Pathology**, v. 2, n. 1, p. 1-11, 2001.

PG89

Functional and structural studies of a fructosyltransferase from *Lactobacillus gasseri* for industrial applications

LIMA, M. Z. T.¹; POLIKARPOV, I.¹; MUNIZ, J. R. C.¹

marianaztdelima@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recent researches have been driven by the search for less aggressive substances for human health. Similarly, investment in the study of enzymes and their products in addition to the optimization of bioprocesses that enable greater efficiency and profitability are featured. The main components used as basis for the functional food industry are carbohydrates called fructooligosaccharides (FOS). (1) Sucrose derivatives are synthesized from enzymes called fructosyltransferase and have many sources; they can be found in plants, bacteria and fungi. The FOS has attracted great interest of the industry due to its physiological and biomodulator features. Because they are considered polysaccharides non-digestible prebiotic, they have the ability to selectively stimulate the growth of bifidobacteria and lactobacilli, assisting in the prevention of tooth decay and colon cancer in humans, and contribute to the reduction of total cholesterol and triglycerides in the blood and promote reabsorption of calcium and magnesium. Because they are low-calorie and high nutritional value sugars, they can be used in diets with dietary restrictions. They are also used in pharmaceutical and cosmetic formulations as stabilizers. (2) Taking as a starting point the differences in catalytic processes and the formation of products, this project sought performing structural and functional characterization of a set of 13 fructosyltransferase enzymes from bacteria and fungi. Thus, the genes in question were cloned and expressed and purified target enzymes. Structural tests were conducted with the same settings for the molecular basis involved in the recognition of the substrate. Eight of them obtained crystals and two enzymes of bifidobacteria and lactobacilli, had resolved its structure and its catalytic site identified. Finally, enzymatic activity assays were performed, including hydrolysis and polymerization of sucrose. The enzyme of *L. gasseri* showed the formation of 1-kestose and nystose with moderate concentrations of sucrose. These FOS have high industrial value because it is the basis of many long-chain FOS and provide numerous features biomodulator and beneficial to the human body. These studies added to the analysis of other enzymes in question will enable the improvement in large-scale production, the methods of optimization and control of these processes for the production of FOS. It is the identification of potential enzyme for the production of compounds used in functional foods and drugs, and the possibility of increasing such production and cheapening of costs thereof by improving for immobilization of enzymes in bioreactors. (3) This is already being carried out with some enzymes producing FOS, but this is the first work where it refers to production of a fructosyltransferase from *L. gasseri*. It is expected that from this work and knowledge thereof industries are interested in the enzymes studied and use of the same for production of their reaction products from a low-cost substrate is used as the case of sucrose. In addition, there is the continuity of this research involving the identification of other enzymes of various organisms and produce other FOS also important to human health.

Keywords: GH32. Fructosyltransferases. *Lactobacillus gasseri*.

Referências:

- 1 DE ROODE, B. M.; FRANSSEN, M. C. R.; VAN DER PADT, A.; BOOM, R. M. Perspectives for the industrial enzymatic production of glycosides. **Biotechnology Progress**, v. 19, n. 5, p. 1391-1402, 2003.
- 2 PATEL, S.; GOYAL, A. Functional oligosaccharides: production, properties and applications. **World Journal of Microbiology and Biotechnology**, v. 27, n. 5, p. 1119-1128, 2011.
- 3 MITSUOKA, T. Development of functional foods. **Bioscience of microbiota, food and health**, v. 33, n. 3, p. 117-128, 2014.

PG90

Injeção de ruído estocástico em sistemas quânticos abertos

LIMA, R. B. B.¹; SOARES-PINTO, D. O¹

rafael.bruno.lima@usp.br

¹Instituto de física de São Carlos - USP

Sistemas físicos reais sempre são afetados pelo ambiente que o envolve, sendo assim entender as leis físicas que governam a evolução de sistemas abertos possui fundamental importância para a comunidade científica. Portanto, todo sistema quântico tem uma interação inevitável com o ambiente que acarreta na perda natural das suas características quânticas, como por exemplo, a coerência e emaranhamento. Nosso trabalho consiste em estudar as consequências da inserção de um bombeio estocástico clássico em sistemas quânticos abertos. (1-2) A inserção desse bombeio gera o que podemos chamar de banho efetivo devido ao acoplamento do sistema com o ruído estocástico e também o ambiente. Temos indícios de que devido a aleatoriedade do bombeio estocástico é gerado um retorno das características quânticas iniciais, ocasionando assim não Markovianidade no sistema. (3) Para isso, vamos calcular a dinâmica do sistema devido a inserção do ruído utilizando equações mestras e estudar como a combinação desse banho efetivo pode gerar a não Markovianidade.

Palavras-chave: Sistemas quânticos abertos. Ruído estocástico. Não Markovianidade.

Referências:

- 1 BUDINI, A. A. Quantum systems subject to the action of classical stochastic fields. **Physical Review A**, v. 64, n. 5, p. 052110-1-052110-12, 2001. doi: 10.1103/PhysRevA.64.052110.
- 2 JAMES, D. F. V. Theory of heating of the quantum ground state of trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 81, n. 2, p. 317, 1998. doi: 10.1103/PhysRevLett.81.317.
- 3 VASILE, R.; MANISCALCO, S.; PARIS, M. G. A.; BREUER, H. P.. Quantifying non-Markovianity of continuous-variable Gaussian dynamical maps. **Physical Review A**, v. 84, n. 5, p. 052118-1-052118-9, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.052118.

PG91

Planejamento e otimização de novos moduladores da proteína tubulina com propriedades antitumorais

MAGALHÃES, L. G.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

luma.magalhaes@usp.br

¹IFSC

O câncer será a segunda maior causa de mortes no mundo em 2015, de acordo com dados da Organização Mundial da Saúde. (1) Somente no Brasil, tivemos um caso por minuto em 2014. A elevada toxicidade dos fármacos disponíveis e o desenvolvimento de resistência aos tratamentos existentes fazem do desenvolvimento de novos agentes antitumorais uma necessidade. Substâncias que interferem no processo de polimerização dos microtúbulos constituem a classe de antitumorais de maior sucesso terapêutico. Além de seu papel na divisão celular, os microtúbulos participam de eventos como a migração celular, que possui papel essencial na metástase (processo responsável por cerca de 90% das mortes por câncer). (2) Uma série de acridinonas sintéticas foi desenvolvida e caracterizada como inibidora da migração de células metastáticas (MDA-MB-231) (valores de IC₅₀ entre 0,3 e 1,7 μ M). As moléculas mais promissoras dessa série mostraram citotoxicidade seletiva às células tumorais (SI > 50) se comparadas com células de fibroblastos não tumorais (FGH). Além disso, as moléculas foram capazes de interromper o ciclo celular na fase G₂/M e promover a apoptose. Estudos de docagem molecular sugeriram que as acridinonas poderiam atuar como inibidoras da polimerização dos microtúbulos devido à interação com o sítio da colchicina na proteína tubulina. Essa característica foi observada *in vitro* (valores de IC₅₀ entre 0,9 e 13 μ M) e seu sítio de interação foi confirmado através de ensaio competitivo. (3) No presente trabalho de doutorado será feita a otimização dessa série de substâncias através do planejamento molecular utilizando métodos de SBDD (*Structure Based Drug Design*) e da busca pela otimização de parâmetros físico-químicos. Estes novos análogos serão submetidos à avaliação biológica e bioquímica, utilizando a metodologia empregada anteriormente, para o estabelecimento de estudos entre a estrutura e a atividade (SAR). Além disso, pretende-se caracterizar outras possíveis propriedades antitumorais destas substâncias como a capacidade anti-angiogênica, já descrita para outros moduladores do sítio da colchicina. As moléculas mais promissoras selecionadas também serão avaliadas quanto à sua farmacocinética *in vitro* e serão submetidas a estudos farmacológicos e toxicológicos. Além disso, três novas séries de moléculas terão seus efeitos antitumorais estudados. São as séries de ciclopentaindóis, espiro-hexadienonas e quinolinas obtidas através de uma colaboração com o prof. Dr. Fernando Antonio Santos Coelho (UNICAMP). A expressão recombinante em células humanas da proteína tubulina também será abordada durante este projeto de doutorado.

Palavras-chave: Câncer. Tubulina. Química Medicinal.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World health statistics 2015**. Disponível em: <http://www.who.int/gho/publications/world_health_statistics/2015/en/>. Acesso em: 03 set. 2015.

2 JORDAN, M. A. ; WILSON, L. Microtubules as a target for anticancer drugs. **Nature Reviews Cancer**, v. 4, n. 4, p. 253-265, 2004. doi: 10.1038/nrc1317.

3 MAGALHÃES, L. G. **Identificação e caracterização de novos agentes com propriedades anticâncer**. 2015. 120p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

PG92

Development and application of high-resolution x-ray imaging techniques for morphological characterization of microfossils

MALDANIS, L.¹; GALANTE, D.²

lara.maldanis@lnls.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - CNPEM

Microfossils are among the most ancient morphological life traces on earth. Their affinity, however, are quite disputed because of the difficulty on identifying biogenic structures in very processed and billion-years-old rocks. A deep understanding and the ability to characterize the first life forms of the planet are crucial steps for a better understanding of the early stages of life on Earth and also for a systematic search of life on other places of the Solar System and even beyond. (1) X-ray imaging techniques are non-destructive and a largely applied approach in fossil characterization, mainly through absorption and phase-contrast methods. However, lens imaging techniques in the X-ray regime, is being developed as an alternative to surpass the limitation of the resolution by diffraction, determined by the formula $d > 0.61 \lambda / NA$, where λ is the wavelength and NA is the numerical aperture of the lens. (2) Since it is impracticable to build very large optical elements, necessary for increasing resolution in this regime, lensless imaging techniques, such as Coherent Diffraction Imaging (CDI) shows up as an alternative approach, which utilizes computational processing to recover the image from the sample diffraction pattern in the far-field. To resolve the phase-problem, the method of Ptychography has been applied in extended samples when a very coherent X-ray beam is available. This approach is based in the multiple illumination through a superposed scanning of the sample, allowing extended areas to be imaged (2,3). In this project we focus in developing and applying the ptychographic CDI method in microfossils, aiming to provide internal information in a subcellular scale. We expect with this to contribute to the fields of paleontology and astrobiology, establishing a feasible methodology that could contribute to the discussion on the biogenicity of the oldest presumed fossils on Earth.

Keywords: Coherent diffraction imaging. Astrobiology. Microfossils.

Referências:

- 1 CADY, S. L. et al. Morphological biosignatures and the search for life on Mars. **Astrobiology**, v. 3, n. 2, p. 351-368, 2003.
- 2 MIAO, J. et al. Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens. **Nature**, v. 400, p. 342-344, 1999. doi: 10.1038/22498.
- 3 MIAO, J. et al. Beyond crystallography: diffractive imaging using coherent x-ray light sources. **Science**, v. 348, n. 6234, p. 530-535, 2015.

PG93

Nanomateriais teranósticos aplicados à problemática do câncer e estudos de toxicidade

MARANGONI, V. S.¹; CANCINO, J.¹; BANKSON, J.²; HALAS, N. J.³; ZUCOLOTTI, V.¹

valeria@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²MDAnderson Cancer Center - University of Texas

³Rice University

O crescente avanço da nanomedicina tem levado ao desenvolvimento de nanomateriais multifuncionais que combinam funções terapêuticas e de diagnóstico em um único sistema, chamados de teranósticos. (1) Além das propriedades diferenciadas advindas da estruturação na escala nanométrica, nanomateriais possibilitam a incorporação de vários tipos de moléculas na sua superfície, fazendo com que desempenhem múltiplas funções. Apesar dos grandes avanços na área, há ainda muitos desafios relacionados principalmente a baixa estabilidade e ao tempo de circulação reduzido. Além disso, a precisa localização dos nanomateriais in vivo tem se mostrado de extrema importância para avaliar sua eficiência e segurança. Neste contexto, o presente projeto de doutorado tem como principal objetivo desenvolver materiais nanoestruturados compostos por nanopartículas e/ou nanorods metálicos, polímeros e biomoléculas para aplicações no diagnóstico e tratamento de câncer. Inicialmente, nanorods de ouro foram sintetizados usando crescimento mediado por nucleação na presença de AgNO₃ e CTAB. Partículas com diferentes comprimentos de onda de ressonância plasmônica de superfície, entre 700 e 850 nm, foram obtidas por meio da variação dos parâmetros de síntese. A absorção em comprimentos de onda na região do infravermelho próximo é importante devido a elevada penetração dessa radiação nos tecidos. (2) Essas estruturas foram recobertas com membranas celulares naturais para melhorar sua biocompatibilidade e camuflar as partículas, prolongando seu tempo de circulação e acumulação no tumor. A estas estruturas serão incorporadas antitumorais, permitindo que estas drogas sejam direcionadas especificamente para o tumor e liberadas por fototerapia. Nanoestruturas multifuncionais que possam ser utilizadas simultaneamente como agentes de contraste em imagens de ressonância magnética (MRI) e no tratamento por fototerapia também foram desenvolvidas. Para isso, quelantes de Gd(III) foram incorporados a estrutura de nanomaterials de ouro, nanopartículas consistindo de uma parte central de ouro, uma camada intersticial de SiO₂ e uma fina cobertura de ouro. Modificações nas espessuras das camadas de SiO₂ e Au refletem diretamente no comprimento de onda de absorção da banda de ressonância plasmônica. As nanoestruturas desenvolvidas foram caracterizadas por técnicas espectroscópicas, de microscopia eletrônica e MRI, além de serem avaliadas com relação a sua toxicidade in vitro. Esses sistemas multifuncionais apresentam elevado potencial para aplicações e abrem novas oportunidades para o desenvolvimento de sistemas cada vez mais eficientes no combate ao câncer.

Palavras-chave: Nanomateriais teranósticos. Câncer. MRI.

Referências:

- 1 BARDHAN, R.; LAL, S.; JOSHI, A.; HALAS, N. J. Theranostic nanoshells: from probe design to imaging and treatment of cancer. **Accounts of Chemical Research**, v. 44, n. 10, p. 936-946, 2011. doi: 10.1021/ar200023x.
- 2 WEISSLEDER, R. A clearer vision for in vivo imaging. **Nature Biotechnology**, v. 19, p. 316-317, 2001. doi: 10.1038/86684.

PG94

Protocolos de imagem por ressonância magnética para análise da morfologia interna de sementes de soja

MARASSI, A. G.¹; GOMES JUNIOR, F. G.²; TANNÚS, A.¹

agide@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz - USP

A Imagem por Ressonância Magnética (IRM) é uma técnica completamente não invasiva originada da interação certos núcleos do objeto com um campo magnético externo, se baseando na codificação especial das frequências de precessão desses núcleos, permitindo à visualização de estruturas internas com alta resolução e contraste. (1) Porém, não existe um estudo detalhado em ressonância magnética que vise à análise da morfologia interna de sementes. O objetivo desse trabalho foi otimizar protocolos de IRM para sementes de soja, permitindo a visualização adequada da morfologia interna. (2) Os tempos de relaxação das sementes foram caracterizados utilizando um magneto Minispec Bruker de 0,5T com o espectrômetro LapNMR Tecmag, com experimentos de 32 médias e 3 s de espera entre médias. O tempo de amostragem foi de 8 μ s, com pulsos de 90° e 180° com duração de 12 μ s e 24 μ s, utilizando 8000 ecos com 200 μ s entre ecos e aquisição do sinal dos ecos centrada entre pulsos de 180° com duração de 128 μ s. Para a aquisição das imagens foi utilizado um magneto supercondutor horizontal de 2T da Oxford Instruments, modelo 85310HR, espectrômetro Bruker Avance AVIII, banda larga de 2 à 400 MHz, dois canais de transmissão e quatro de recepção, fontes de gradientes de 300V/200A, 12 canais de shimming, gradientes de 16 Gauss/cm e dois amplificadores de radiofrequência de 1 e 2 kW, operados pelo software Paravision 5.1. A bobina utilizada foi do tipo solenoide com 5 voltas e diâmetro interno de 8 mm. A sequência FLASH (Fast-low angle shot) (3) foi utilizada na aquisição das imagens, cujos parâmetros foram: TR = 100 ms, TE = 3.3 ms, ângulo de flip = 45°, 8 médias, TA = 20 minutos, FOV = 12 x 12 x 8 mm³, matriz = 96 x 96 x 16, produzindo uma resolução de 125 x 125 x 500 μ m³. Foi possível identificar tecidos deteriorados em seus diversos estágios de ocorrência e também tecidos diferenciados de transportes de nutrientes dos cotilédones ao eixo do embrião com a hidratação das sementes.

Palavras-chave: Glycine max. Análise de imagens. Qualidade de sementes.

Referências:

- 1 KÖCKENBERGER, W.; PANFILIS, C.; SANTORO, D.; DAHIYA, P.; RAWSTHORNE, S. High resolution NMR microscopy of plants and fungi. **Journal of Microscopy**, v. 214, n. 2, p. 182-189, 2004. doi: 10.1111/j.0022-2720.2004.01351.x.
- 2 BORISJUK, L.; ROLLETSCHEK, H.; NEUBERGER, T. Nuclear magnetic resonance imaging of lipid in living plants. **Progress in Lipid Research**, v. 52, n. 4, p. 465-487, 2013. doi: 10.1016/j.plipres.2013.05.003.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

3 HAASE, A. ; FRAHM, J.; MATTHAEL, D.; HÄNICKE, W.; MERBOLDT, K. FLASH imaging. Rapid NMR imaging using low flip-angle pulses. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 67, n. 2, p. 258-266, 1969. doi: 10.1016/0022-2364(86)90433-6.

PG95

Avaliação hepática utilizando ressonância magnética: validação do método para quantificação de gordura

MARQUES, M. R. H.¹; PAIVA, F. F.¹

marcia.renata.marques@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O fígado gorduroso, doença tecnicamente denominada esteatose hepática, é um problema que vem preocupando a comunidade médico-científica em todo o mundo. Já é a doença hepática de maior prevalência nos Estados Unidos e no Brasil o problema já atinge cerca de 20% da população. Obesidade, diabetes tipo II e alcoolismo estão entre as principais causas da doença que, apesar de ser considerada benigna, pode evoluir para comorbidades mais graves como cirrose, fibrose avançada ou esteato hepatite. Os métodos atuais para diagnóstico e quantificação da gordura ainda são falhos: a ultrassonografia não é quantitativa e a quantificação por punção, atual padrão ouro, é precisa, porém invasiva e pontual. A Ressonância Magnética (RM), tanto com espectroscopia (MRS) como com imagens (MRI), surge como uma alternativa completamente não invasiva, para o diagnóstico e quantificação da gordura hepática. A espectroscopia é tecnicamente mais complexa, limitada e sujeita às variações do paciente, assim como a biópsia. Isso é um problema no caso de esteatose focal, na qual somente uma pequena região do fígado é acometida. Já a MRI é mais prática e fornece informações globais. (1) O presente estudo visa correlacionar dados de biópsia com os valores de MRS e MRI e, assim, comparar a eficiência da RM com o padrão ouro de quantificação. Oitenta pacientes, portadores de diabetes tipo II, foram avaliados em um sistema de RM de 3.0T e, posteriormente, submetidos à biópsia. Dados espectroscópicos foram adquiridos utilizando uma sequência PRESS com os seguintes parâmetros: TR=2000ms, TE=40ms, 50ms, 60ms, 70ms, 80ms, 90ms, 100ms e 110ms, uma média e voxel cúbico de 25x25x25mm. Os dados foram processados utilizando o AMARES, incluído no software jMRUI, com correção monoexponencial do T2* (2) realizada no OriginPro. Imagens foram adquiridas utilizando uma sequência Eco de Gradiente de três modos distintos: duplo eco (TE=1.15ms e 2.30ms), triplo eco (TE=2.30ms, 3.45ms e 4.60ms) e multieco (TE=1.15ms, 2.30ms, 3.45ms, 4.60ms, 5.75ms, 6.90ms, 8.05ms). Para realização da quantificação, ROIs foram desenhadas no lobo V do fígado, utilizando o software MIPAV, seguidas de correção monoexponencial de T2* (exceto duplo eco). (3) Foram feitas análises de correlação entre as técnicas de RM e biópsia. Considerando a amostra completa, não foi possível observar correlação entre análise histológica e MRS, muito embora MRI e biópsia tenham apresentado alta correlação. Essa correlação é maior para modelos mais complexos de quantificação, utilizando mais ecos para avaliação, o que está de acordo com a literatura atual. Uma hipótese para a divergência observada entre os dados de MRS e seu correspondente dado de imagens e biópsia está na presença de esteatose focal. Os dados estão sendo reavaliados individualmente para que essa hipótese seja verificada o que comprovaria a necessidade de um método de avaliação mais global como, por exemplo, imagens por RM. Os dados preliminares mostram que RM pode fornecer, de maneira completamente não invasiva, informações importantes para o diagnóstico e caracterização da esteatose. O refinamento das análises deve esclarecer dúvidas acerca da eficiência de cada um dos métodos baseados em RM, e sinalizar qual a vertente mais promissora.

Palavras-chave: MRI. MRS. Esteatose hepática.

Referências:

- 1 SATKUNASINGHAM, J.; BESA, C.; BANE, O.; SHAH, A.; OLIVEIRA, A.; GILSON, W.D.; KANNENGISSER, S.; TAOULI, B. Liver fat quantification: comparison of dual-echo and triple-echo chemical shift MRI to MR spectroscopy. **European Journal of Radiology**, v. 84, n. 8, p. 1452-1458, 2015. doi: 10.1016/j.ejrad.2015.05.001.
- 2 HAMILTON, G.; YOKOO, T.; BYDDER, M.; CRUITE, I.; SCHROEDER, M. E.; SIRLIN, C. B.; MIDDLETON, M. S. In vivo characterization of the liver fat 1H MR spectrum. **NMR in Biomedicine**, v. 24, n. 7, p. 784-790, 2011. doi: 10.1002/nbm.1622.
- 3 YOKOO, T.; BYDDER, M.; HAMILTON, G.; MIDDLETON, M. S.; GAMST, A. C.; WOLFSON, T.; HASSANEIN, T.; PATTON, H. M.; LAVINE, J. E.; SCHWIMMER, J. B.; SIRLIN, C. B. Nonalcoholic fatty liver disease: diagnostic and fat-grading accuracy of low-flip-angle multiecho gradient-recalled-echo MR imaging at 1.5 T. **Radiology**, v. 251, n. 1, p. 67-76, 2009. doi: 10.1148/radiol.2511080666.

PG96

Desigualdades de Bell: uma conexão com a Teoria de Jogos Bayesianos

MARTINELLI, T.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

tiago.martinelli@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O teorema de Bell, 1964, que afirma que as previsões da teoria quântica não podem ser explicadas por qualquer teoria realista local, representa um dos desenvolvimentos mais profundos nos fundamentos da Física. Nas últimas duas décadas, o teorema de Bell tem sido um tema central da pesquisa a partir de uma variedade de perspectivas, motivado principalmente pela Ciência da Informação Quântica, em que a não-localidade da teoria quântica está subjacente a muitas das vantagens oferecidas por um processamento quântico de informações. Mais precisamente, John Bell mostrou que em cenários de uma teoria realista local, correlações entre quaisquer variáveis ocultas devem satisfazer restrições específicas (conhecidas como desigualdades de Bell) quando sujeitas ao que chamamos de testes de Bell. Essas restrições podem ser violadas se considerarmos, e.g., dois observadores espacialmente separados que compartilham um par de bits quânticos emaranhados, criando correlações quânticas que não podem ser explicadas em tais cenários. (1) Curiosamente, tem sido apontado que este conceito de Física (desigualdades de Bell) está intimamente relacionado com o conceito de Teoria dos Jogos (jogos Bayesianos), dois temas aparentemente distintos. Discutiremos aqui que a expressão Bell e a função de compensação esperada têm a mesma forma, de modo que se a mecânica quântica viola uma desigualdade de Bell específica, podendo gerar correlação não-local entre os jogadores, temos que a função de compensação esperada terá um valor mais alto, ou seja, sendo mais vantajoso o jogo, quando jogado com estratégias quânticas. Jogos Bayesianos que estão relacionados com as desigualdades de Bell são freqüentemente chamados de "jogos" não-locais. Visando clareza, usaremos um exemplo simples de jogo que no final recuperará uma expressão muito conhecida em mecânica quântica e com um papel fundamental em verificações experimentais, derivada em 1969 por Clauser-Horne-Shimony-Holt (CHSH), sendo a mais simples desigualdade de Bell. (2) Recentemente, mostrou-se também que o recurso não-local da mecânica quântica pode oferecer uma vantagem num cenário onde os dois jogadores possuem interesses conflitantes, com as estratégias quânticas superando as clássicas novamente, contrastando com os exemplos conhecidos, que consideram jogos em que os dois jogadores têm um interesse comum, uma vez que eles ganham ou perdem o jogo conjuntamente. Olhar para desigualdades de Bell através da visão de jogos tem sido muito útil na prática, por exemplo, em criptografia e informação quântica a mecânica quântica nos dá garantias de segurança mais forte, quando comparadas com teorias clássicas, em distribuição quântica de chaves. (3)

Palavras-chave: Teoria da Informação Quântica. Desigualdades de Bell. Jogos Quânticos.

Referências:

1 BRUNNER, N. Bell nonlocality. **Review of Modern Physics**, v. 86, n. 2, p. 419-478, 2014. doi:

10.1103/RevModPhys.86.419.

2 BRUNNER, N.; LINDEN, N. Connection between Bell nonlocality and Bayesian game theory. **Nature Communications**, v. 4, p. 2057-1-2057-6, 2013. doi: 10.1038/ncomms3057.

3 PAPPÀ, A. et al. Nonlocality and conflicting interest games. **Physical Review Letters**, v. 114, n. 2, p. 020401-1-020401-5, 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.020401.

PG97

Análises da influência dos domínios carboxi-terminais das septinas na interação septina-septina

MARTINS, C. S¹; MACEDO, J. N. A¹; ARAUJO, A. P. U. de¹

carlamartins@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas pertencem a uma família de proteínas de ligação a GTP, identificadas primeiramente em leveduras, e que estão presente em diversos organismos eucariotos com exceção de plantas. Embora as primeiras septinas tenham sido relacionadas a mutantes para o ciclo celular em leveduras, sua participação nos processos celulares incluem citocinese, determinação e manutenção da polaridade celular, associação a membranas, movimento celular, tráfego de vesículas, entre outros. As septinas apresentam três domínios: um domínio central de ligação a GTP (domínio G) e dois domínios flanqueadores amino-terminal e carboxi-terminal (domínios N e C). As septinas têm como característica a capacidade de interagirem entre si formando heterocomplexos que polimerizam, constituindo filamentos. (1) Em mamíferos, as diferentes septinas são classificadas em quatro grupos, com base na similaridade da estrutura primária, sendo proposto que as septinas poderiam ser substituídas no complexo por outra do mesmo grupo para a formação do filamento. Em humanos há 13 septinas, sendo o complexo composto por SEPT2, SEPT6 e SEPT7, o melhor caracterizado estruturalmente, apresentando-se como um hexâmero linear com a seguinte disposição: SEPT7-SEPT6-SEPT2-SEPT2-SEPT6-SEPT7. Nesse cristal, os domínios C, embora presentes nas proteínas, não apresentaram densidade eletrônica, sugerindo desordenação no cristal. Porém, há outras evidências que os domínios C das duas unidades de SEPT2 e os domínios C de SEPT7 e SEPT6 interajam formando um *coiled-coil*, homodimérico e heterodimérico, respectivamente. (2) Até o momento, pouco se sabe sobre os fatores que determinam a seleção do parceiro correto de interação para a montagem dos complexos. Entretanto, várias evidências sugerem que os domínios C sejam os principais responsáveis por tal seleção. (3) Neste contexto, o objetivo deste projeto é avaliar a importância dos domínios C na seleção dos parceiros entre septinas. Para isso, septinas quiméricas foram produzidas de forma que os domínios C de septinas que possuem *coil-coiled* fossem substituídos no domínio G a fim de proporcionar o C-terminal preferencial da interação. Assim, numa primeira abordagem, o C-terminal de SEPT6 substituiu o mesmo domínio na estrutura da SEPT2, gerando a quimera SEPT2_{6C}. Na mesma linha de raciocínio, obtivemos SEPT5_{8C}, uma vez que a SEPT5 pertence ao mesmo grupo da SEPT2 e a SEPT8, ao mesmo da SEPT6, podendo haver tais substituições no complexo proteico. A seguir, a SEPT7, naturalmente parceira de SEPT6 e SEPT8, mas não de SEPT2, foi coexpressa em bactérias com as proteínas quiméricas e também com as proteínas selvagens, como controle. O sucesso na copurificação da SEPT7 com as quimeras, mas não com as proteínas selvagens, por cromatografia de afinidade e posterior análise por *Western Blot* permitiram avaliar que apenas os domínios carboxi-terminais são suficientes para determinar a seleção dos parceiros para a interação N/C no complexo. Uma vez que o resultado qualitativo da seleção de parceiros foi positivo, técnicas biofísicas, como ITC e espectroscopia de fluorescência, estão sendo avaliadas para quantificar a força da interação estabelecida pela quimera.

Palavras-chave: Septinas. Carboxi-terminais. Interação proteica.

Referências:

- 1 CAO, L. et al . The evolution, complex structures and function of septin proteins. **Cellular and Molecules Life Science**, v. 66 , n. 20, p. 3309-3323, 2009. doi: 10.1007/s00018-009-0087-2.
- 2 SIRAJUDDIN, M. et al . Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007. doi: 10.1038/nature06052.
- 3 ALMEIDA, I. A et al . Septin C-terminal domain interactions: implications for filament stability and assembly. . **Cell Biochemistry and Biophysics**, v. 62, n. 2, p. 317-328, 2012. doi: 10.1007/s12013-011-9307-0.

PG98**Emaranhamento em sistemas óptico-mecânicos**MASCHIO, E. H. M.¹; DUARTE, O.¹

eduardo.maschio@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os efeitos da pressão de radiação têm sido estudados desde o século 17, com os trabalhos de Kepler. Posteriormente, com o trabalho de Einstein de 1909, envolvendo a estatística das flutuações da força da pressão de radiação em um espelho móvel, permitiu-o revelar a natureza dual onda-partícula da radiação de corpo negro. Desde então, muitos trabalhos envolvendo sistemas óptico-mecânicos, tanto teóricos quanto experimentais, têm sido propostos em escalas cada vez menores. O crescente interesse nestes sistemas óptico-mecânicos vem principalmente do fato de haver uma grande sensibilidade para a medida de pequenos valores de quantidades físicas como massa, deslocamento, e acelerações, além de ser possível detectar e manipular estados não-clássicos da luz e de movimentos mecânicos (1), sendo este último de grande interesse para a Informação Quântica. Um sistema óptico-mecânico muito utilizado atualmente é um esquema contendo uma cavidade acoplada por uma de suas extremidades a um modo mecânico. Tal sistema tem apresentado uma variedade de possibilidades no estudo de estados não-clássicos em cavidades, como demonstrado no trabalho de Bose *et al.* (2) Neste presente trabalho apresentamos um sistema composto de uma cavidade acoplada com dois modos mecânicos, em cada uma de suas extremidades. Através de um método para a detecção de emaranhamento multipartido proposto por van Loock e Furusawa (3), foram analisadas a dinâmica de emaranhamento em algumas condições, como a ausência e presença de bombeio externo na cavidade, acoplamento forte e fraco entre os modos mecânicos e a cavidade. A aplicação do método possibilitará obter mais informações acerca do papel da não-linearidade no emaranhamento entre as diferentes partes que compõe o sistema, além de permitir uma análise da influência e relação de diferentes parâmetros do sistema no emaranhamento.

Palavras-chave: Sistema óptico-mecânico. Emaranhamento. Dinâmica não-linear.**Referências:**

- 1 ASPELMEYER, M.; KIPPENBERG, T. J.; MARQUARDT, F.. Cavity optomechanics. **Reviews of Modern Physics**, v. 86, n. 4, p. 1391, 2014. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.86.1391>.
- 2 BOSE, S.; JACOBS, K.; KNIGHT, P. L. Preparation of nonclassical states in cavities with a moving mirror. **Physical Review A**, v. 56, n. 5, p. 4175, 1997.
- 3 LOOCK, P. van ; FURUSAWA, A. Detecting genuine multipartite continuous-variable entanglement. **Physical Review A**, v. 67, n. 5, p. 052315, 2003. doi: [10.1103/PhysRevA.67.052315](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.67.052315) .

PG99

Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco *Gymnotus carapo*

MATIAS, P¹; SLAETS, J. F. W¹

paulo.matias@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Peixes elétricos de campo elétrico fraco da espécie *Gymnotus carapo* comunicam-se emitindo pulsos de formato aproximadamente fixo, variando apenas o intervalo entre disparos de acordo com a informação a ser transmitida. (1) Esse tipo de codificação simples é bastante similar ao encontrado em diversos sistemas de neurônios conhecidos, o que torna esses animais muito interessantes para o estudo de sistemas de comunicação, propiciando experimentos que envolvem tanto aspectos comportamentais quanto de codificação neural. O desenvolvimento de instrumentação eletrônica e de métodos de processamento de sinais permite a realização de novas variedades de experimento, expandindo os horizontes da pesquisa na área. Foi criado um método para a realização de experimentos *in vivo*, não-invasivos, com dois peixes nadando livremente em um mesmo aquário, utilizando-se duas diferentes técnicas de processamento digital de sinais. A primeira consiste em identificar características individuais presentes no formato dos pulsos de eletrocomunicação de cada peixe por meio de ferramentas como a transformada wavelet complexa de dupla árvore (2) e a máquina de vetores de suporte. (3) A segunda técnica utiliza o comportamento de continuidade da amplitude e da fase dos sinais coletados em um conjunto de eletrodos para identificar um pulso com base no pulso anterior emitido pelo mesmo peixe. Desenvolvemos, com o auxílio de dispositivos de lógica reconfigurável (FPGA) e de sistemas operacionais de tempo real (RTOS), uma instrumentação eletrônica para a realização de experimentos com retroalimentação (*feedback*) em tempo real, o que permitirá estudar a existência de mecanismos de JAR (*jamming avoidance response*), além dos mecanismos de comunicação social entre indivíduos da espécie. Desta forma, serão realizados experimentos *in vivo* inéditos, com um grau de naturalismo e liberdade de experimentação bastante acima do encontrado atualmente na literatura.

Palavras-chave: Neurobiofísica. Processamento de sinais. Aprendizagem de máquina.

Referências:

- 1 BENNETT, M. V.; GRUNDFEST, H.. Electrophysiology of electric organ in *Gymnotus carapo*. **The Journal of General Physiology**, v. 42, n. 5, p. 1067-1104, 1959. doi: 10.1085/jgp.42.5.1067.
- 2 BAYRAM, I.; SELESNICK, I.. On the dual-tree complex wavelet packet and m-band transforms. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 56, n. 6, p. 2298-2310, 2008. doi: 10.1109/TSP.2007.916129.
- 3 CORTES, C.; VAPNIK, V.. Support-vector networks. **Machine Learning**, v. 20, n. 3, p. 273-297, 1995. doi: 10.1007/BF00994018.

PG100

Modelos *in silico* preditivos nos estudos de permeabilidade

MATOS, K. S.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

karinamatos@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Após ser oralmente administrado o fármaco deve ser dissolvido e solubilizado no trato gastrointestinal, e posteriormente ser absorvido no estômago ou intestino, neste caso, denominada absorção intestinal humana (do inglês, *Human Intestinal Absorption - HIA*) é uma das mais importantes vias. (1) Modelos *in vitro*, que mimetizam membranas e barreiras biológicas são usados para estudos de permeabilidade, tais como o ensaio de permeabilidade em membrana artificial paralela, PAMPA (do inglês, *Parallel Artificial Membrane Permeability Assay*) (2), além do emprego fundamental de modelos *in silico* na avaliação de propriedades físico-químicas e farmacocinéticas de substâncias bioativas. (3) PAMPA é usado para medir a permeabilidade de pequenas moléculas por transporte passivo e foi originalmente desenvolvido como um método para prever a absorção transcelular de fármacos usando um lipídeo imobilizado sobre um filtro suporte para mimetizar uma membrana celular (2). Neste trabalho são descritos modelos *in silico* preditivos, através do método de fragmentos moleculares, holograma QSAR (HQSAR), para a avaliação dos parâmetros que definem a permeabilidade de compostos bioativos em PAMPA, a partir de dados de permeabilidade da literatura. Estes modelos são de grande relevância, pois poderão ser aplicados a ensaios biológicos experimentais de determinação de propriedades farmacocinéticas, para diversos compostos em estudo no LQMC. Os melhores resultados estatísticos, tais como o valor de coeficiente de correlação linear quadrático com validação cruzada ($q^2 = 0,64$) para um conjunto treinamento de 65 compostos, foram obtidos utilizando a combinação A/B/C/H de fragmentos moleculares. O valor de r^2 (0,92) adequado sugere que valores de permeabilidade em PAMPA podem ser preditos por um modelo construído com as variáveis deste conjunto de dados. Foi observada, uma boa concordância entre os valores de permeabilidade preditos e experimentais para a validação interna e externa do modelo, indicada pelo valor de r^2 predito (r^2_{pred}) para um conjunto teste de 12 compostos, igual a 0,72. A estratégia de modelagem molecular abordando modelos preditivos para mimetização de propriedades que influenciam a administração de fármacos por via oral é uma ferramenta útil no planejamento de compostos bioativos. Estes modelos poderão auxiliar no planejamento de novos candidatos a fármacos em nosso laboratório.

Palavras-chave: PAMPA. HIA . Modelagem HQSAR.

Referências:

- 1 MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. Consensus hologram QSAR modeling for the prediction of human intestinal absorption. **Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters**, v. 22, n. 8, p. 2889-2893, 2012.
- 2 BERMEJO, M. et al. PAMPA - a drug absorption *in vitro* model 7. Comparing rat *in situ*, caco-2, and PAMPA permeability of fluoroquinolone. **European Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 21, n.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

4, p. 429-441, 2004.

3 WATERBEEMD, H. VAN DE. Improving compound quality through *in vitro* and *in silico* physicochemical profiling. **Chemistry & Biodiversity**, v. 6, n. 11, p. 1760-1766, 2009.

PG101

Caracterização estrutural e funcional de FleQ: um fator de transcrição que regula formação de flagelo e biofilme.

MATSUYAMA, B. Y.¹; KRASTEVA, P. V.²; BARAQUET, C.³; HARWOOD, C. S.³; SONDERMANN, H.⁴; NAVARRO, M. V. A. S.¹

brunomatsuyama@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Unité G5 Biologie Structurale de la Sécrétion Bactérienne - Institut Pasteur

³Department of Microbiology - University of Washington

⁴Department of Molecular Medicine - Cornell University

Biofilmes são comunidades bacterianas sésseis embebidas por uma matrix exopolissacarídica. (1) Nos últimos anos a formação de biofilmes tem sido elucidada a nível molecular, com destaque para o mensageiro secundário c-di-GMP, encontrado apenas em bactérias e cujos níveis intracelulares regulam entre outros processos a adesão celular e a síntese da matriz exopolissacarídica, controlando a formação do biofilme, responsável por diversas doenças infecciosas. (2) Em *Pseudomonas aeruginosa* foi identificado um fator de transcrição não usual da família das "Enhancing Binding Proteins" (EBP), FleQ, que é regulado por c-di-GMP. FleQ possui um domínio N-terminal de função desconhecida, um domínio AAA ATPase central e um motivo hélice-volta-hélice, de ligação à DNA. Em conjunto com uma segunda proteína, FleN, FleQ atua tanto na transcrição de genes flagelares quanto na regulação do *operon pel*, envolvido na síntese de exopolissacarídeos. Embora se saiba que a interação com c-di-GMP converte FleQ de repressor para ativador do *operon pel*, aspectos moleculares dessa regulação são desconhecidos. (3) Para compreender melhor o mecanismo de ação da FleQ, resolvemos as estruturas tanto do seu domínio N-terminal, como o AAA central, na sua forma apo e complexada com c-di-GMP, ADP e ATPyS. O domínio N-terminal de FleQ é estruturalmente semelhante ao domínio REC de EBPs, contudo não possui o sítio de fosforilação conservado e nem uma histidina quinase associada, e apresenta uma interface de conservação de resíduos distinta dos domínios REC. Acreditamos que essa interface seja a região por meio da qual FleN regula a atividade de FleQ. Além disso, observamos que o domínio AAA assume a conformação de um anel hexamérico e a ligação de c-di-GMP promove um rearranjo desse anel para um novo hexâmero mediado por c-di-GMP, estabilizando um loop que impede a ligação de ATP no seu sítio catalítico. A inibição da atividade ATPase por meio da ligação de c-di-GMP faria com que FleQ se tornasse incapaz de promover a transcrição dos genes flagelares. Análise do empacotamento cristalino também nos permitiu propor mutações que afetariam os diferentes hexâmeros de FleQ. Dessa forma, ensaios de cross linking químico permitiram confirmar o efeito dessas mutações e da ligação de diferentes nucleotídeos (c-di-GMP e/ou ATPyS) na oligomerização de FleQ. Em parceria com a Dr.^a Caroline Harwood, da University of Washington, ensaios de RT-PCR mostraram que o anel hexamérico é essencial para a repressão da transcrição do *operon pel*. Esses resultados nos permitiram propor um modelo para regulação do operon pel, no qual a oligomerização de FleQ tem um papel crucial. FleQ é

uma das poucas proteínas que regulam dois fenótipos distintos, esses experimentos nos permitiram melhor entender o mecanismo pelo qual EBPs regulam a transcrição, nos levando a um maior entendimento do sistema de sinalização bacteriano.

Palavras-chave: FleQ. c-di-GMP. Biofilme.

Referências:

- 1 TOOLE, G.; KOLTER, R.. Biofilme formation as microbial development. **Annual Review of Microbiology**, v. 54, p. 49-79, 2000.
- 2 RÖMLING, U.; GOMELSKY, M.; GALPERIN, M.Y.. c-di-GMP: the dawning of a novel bacterial signalling system. **Molecular Microbiology**, v. 57, n. 3, p. 629-639, 2005.
- 3 BARAQUET, C.; MURAKAMI, K.; PARSEK, M.R.; HARWOOD, C.S.. The FleQ protein from *Pseudomonas aeruginosa* functions as both a repressor and an activator to control gene expression from the *pel operon* promoter in response to c-di-GMP.. **Nucleic Acids Research**, v. 40, n. 15, p. 7207-7218, 2012. doi: 10.1093/nar/gks384.

PG102

Spatial and temporal localization of light in two dimensions

MAXIMO, C.E.¹; PIOVELLA, N.²; COURTEILLE, Ph. W.¹; KAISER, R.³; BACHELARD, R.¹

dumax1@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Dipartimento di Fisica, Università Degli Studi di Milano

³Université de Nice Sophia Antipolis, Institut Non-Linéaire de Nice

Multiple scattering of waves has been the subject of intense debates and proliferic studies in the context of disorder-induced Anderson localization. (1). However, despite several decades of research, the mere existence of Anderson localization of light (2) and its relation to another long predicted phenomenon, namely Dicke super- and subradiance (3), are still not clearly understood. As most experiments are typically performed in a three dimensional setting, models have also been focused on such 3D configurations. However, both numerical and fundamental aspects of localization strongly depend on the dimension of the explored system. For this reason, we have focused our efforts on a 2D system. Two-dimensional set-up can be obtained, e.g., with a disordered arrangement of scatterers in microwave cavities, in photonic crystals, near surface plasmons or with laser-cooled atoms located in an off-resonance optical cavity. The main advantage of that the reduced dimensionality also allows for a direct comparison between two regimes of scattering, one corresponding to a scalar model of light, the other one corresponding to a vectorial model of light, where the polarization of the wave needs to be taken into account. Then we are able to switch between the scalar or vectorial regime, between the presence or the absence of polarization degrees of freedom, and the presence or the absence of near field terms, making it an ideal tool to investigate the role of polarization in localization and subradiance. Performing scaling analysis we observe in both cases long lived atomic modes of the scattering, yet only the scalar case exhibits Anderson localized modes. Investigating the reasons for the absence of localization in cold atoms ensembles, it appears that both the coupling of polarization and the presence of near field terms are able to prevent long lifetimes and Anderson localization. We finally show that, albeit extremely long mode lifetimes are present only in localization regime, this lifetimes and their localization length are uncorrelated.

Keywords: Multiple scattering of light. Anderson localization of light. Cold atoms.

Referências:

1 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical Review**, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958. doi: 10.1103/PhysRev.109.1492.

2 SKIPETROV, S. E.; SOKOLOV, I. M. Absence of Anderson localization of light in a random ensemble of point scatterers. **Physical Review Letters**, v. 112, n. 2, p. 023905, 2014. doi:



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

10.1103/PhysRevLett.112.023905.

3 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review**, v. 93, n. 1, p. 99–110, 1954. doi: 10.1103/PhysRev.93.99.

PG103

Estudos de metatranscriptômica: identificação e caracterização de novas enzimas com potencial na hidrólise de ligações glicosídicas

MELLO, B. L.¹; POLIKARPOV, I.¹

bruno.luan.mello@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com o aumento da população mundial, a vida moderna cada vez mais dependente de eletricidade e o desenvolvimento econômico dos países subdesenvolvidos, o consumo de energia no mundo tem aumentado a uma taxa acelerada. No Brasil, por exemplo, houve um aumento de 50% entre 1996 e 2010. (1) Esse aumento na demanda e a necessidade da diversificação da matriz energética aliados à preocupação com o meio ambiente torna necessária a busca por novas fontes energéticas renováveis. A biomassa pode ser usada alternativamente para a produção do chamado etanol de segunda geração. Entretanto, atualmente os altos custos envolvidos no seu pré-tratamento, transporte e na produção de enzimas tornam o processo economicamente não viável. (2) Enquanto a hidrólise da biomassa é um problema para a indústria, ela é realizada efetivamente na natureza por comunidades microbianas. Contudo, como menos de 1% dos microorganismos é cultivável em cultura pura, a hidrólise da mesma foi estudada utilizando apenas alguns poucos organismos modelo. (3) Neste trabalho, objetiva-se descobrir novas enzimas e proteínas associadas à digestão da lignocelulose, de forma a tornar a hidrólise da biomassa mais eficiente e barata. Para isso foi estudada uma comunidade microbiana capaz de decompor o bagaço de cana-de-açúcar. Essa comunidade foi crescida em meio mínimo suplementado com bagaço de cana-de-açúcar e o seu metatranscriptoma foi sequenciado ao longo de 5 semanas gerando cerca de 35 gigabases de dado. A partir da análise dos dados obtidos, 48 genes foram escolhidos, sintetizados e clonados. Testes de expressão em *Escherichia coli* revelou que 18 deles são expressos solúveis nesse sistema. Futuramente ensaios de atividade e de caracterização bioquímica/biofísica serão realizados para revelar os mecanismos de ação na hidrólise da biomassa dessas novas proteínas encontradas.

Palavras-chave: Etanol de segunda geração. Metatranscriptômica. Compostagem.

Referências:

- 1 EMPRESA DE PESQUISA ENERGETICA. **Balanco Energético Nacional 2011 - Ano Base 2010**. Disponível em: <https://ben.epe.gov.br/downloads/Relatorio_Final_BEN_2011.pdf>. Acesso em: 14 ago. 2015.
- 2 HOOD, E. E. et al. Subcellular targeting is a key condition for high-level accumulation of cellulase protein in transgenic maize seed. **Plant Biotechnology Journal**, v. 5, n. 6, p. 709-719, 2007.
- 3 WARNECKE, F.; HESS, M.. A perspective: metatranscriptomics as a tool for the discovery of novel biocatalysts. **Journal of Biotechnology**, v. 142, n. 1, p. 91-95, 2009.

PG104

DNA encapsulation for antisense gene therapy

MELO, C. C.¹; ZUCOLOTTO, V.¹; BERNARDI, J. C.¹

criscasonatomelo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In 1978, Stephenson and Zamecnik observed that it was possible to use a specific sequence of oligonucleotides to interfere in the translational process inside the cells. (1) In this scenario, two techniques that bind to a specific target in the messenger RNA have been explored: antisense therapy and interference RNA, and both are supposed to cause a decrease in the translation of a protein. (1) The great difference between these two technologies is regarded to the RNase machinery involved in the process for interference RNA, while for antisense technology, RNase H (1). Through these technologies, it may be possible to provide a more effective treatment for some diseases combining nanomaterials, and it might offer a first treatment to other diseases that nowadays have still no cure. In this project, the model disease to be studied is the hereditary hemochromatosis, it can be caused by several mutations related to genes involved in iron metabolism, and the most usual is the mutation in the HFE gene (C282Y). (2) The disease is characterized by an iron overload in the body that can cause since simple fatigue to cirrhosis, and the currently treatment is bleeding, which is not very efficient as there are no studies indicating when it should start and in which frequency it should be performed. (2) Despite the great potential of antisense therapy to treat genetic diseases such as hereditary hemochromatosis, this technique has a great difficulty related to the delivery of stable oligonucleotides to target cells. Thus, the aim of this study is to join nanotechnology to antisense gene therapy as a solution for the delivery and stability problems. (3) The initial idea is to use nanoparticles from biodegradable and biocompatible polymers to encapsulate oligonucleotides for application in medicine in genetic diseases, especially hemochromatosis.

Keywords: Antisense gene therapy. Hemochromatosis. Polymeric nanoparticles.

Referências:

- 1 ACHENBACH, T. V.; BRUNNER, B.; HEERMEIER, K.. Oligonucleotide-based knockdown technologies: antisense versus RNA interference. **ChemBioChem**, v. 4, n. 10, p. 928-935, 2003.
- 2 PIETRANGELO, A. Hereditary hemochromatosis: pathogenesis, diagnosis, and treatment. **Gastroenterology**, v. 139, n. 2, p. 393-408, 2010.
- 3 JHAVERI, A. M.; TORCHILIN, V. P. Multifunctional polymeric micelles for delivery of drugs and siRNA. **Frontiers in Pharmacology**, v. 5, n. 77, p. 1-26, 2014.

PG105

Exploring the selectivity of metal ions in the active site of superoxide dismutase enzyme using site-directed mutagenesis

MENDONZA, E.¹; GARRATT, R.¹; PENNER-HAHN, J. E.²

mery_mendoza17@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²University of Michigan

Superoxide dismutases (SODs) are crucial metalloenzymes that protect cells against oxidative stress.(1-2) Among these SODs, FeSOD and MnSOD have sequences that are highly conserved, especially those residues that are close to the active site (including all direct metal ligands). With few exceptions, each enzyme is specific for only one of the two metals, a fact which cannot be explained trivially. Bachega and colleagues (3) undertook a statistical coupling analysis (SCA) of the sequences of Fe/MnSOD and demonstrated that clusters of residues close to the active site were different in the two groups of enzymes, suggesting that these residues may be responsible for fine-tuning the redox potential of the metal necessary for catalytic activity. The objective of the present study is to apply site-directed mutagenesis to these residues, employing MnSOD from *Trichoderma reesei* (TrSOD) as a model, in order to verify the structural determinants of metal specificity. We produce H75I TrMnSOD, D150G TrMnSOD and Q172D TrMnSOD mutants which were grown in the presence of excess iron and analyzed by EPR spectroscopy and X-ray crystallography. Mutant enzymes showed small changes their Fe(III) EPR spectra. Crystals of SOD mutants H75I, D150G and Q172D diffracted to 2.03Å, 1.85Å and 3.1Å resolution respectively. Diffraction data was collected and processed and the corresponding structures refined. The final Rwork and Rfree values for the H75I and D150G structures are 0.1593, 0.1875 and 0.161, 0.1841 respectively. The crystallographic and EPR data obtained thus far strongly suggest that significant perturbations to the structure may occur as a function of mutations which are relatively distant from the active site. Further studies are required to probe the impact of such changes on metal ion selectivity. These results contribute to our understanding of the structural details of the fine-tuning specificity to the metal ion in the active site.

Keywords: Superoxide dismutases. Metalloenzymes. Crystallography.

Referências:

- 1 SHENG, Y. et al. Superoxide dismutases and superoxide reductases. **Chemical Review**, v. 114, n. 7, p. 3854-3918, 2014. doi: 10.1021/cr4005296.
- 2 MILLER, A. F. Superoxide dismutases: ancient enzymes and new insights. **FEBS Letters**, v. 586, n. 5, p. 585-595, 2012. doi: 10.1016/j.febslet.2011.10.048.
- 3 BACHEGA, J. F. R. et al. Systematic structural studies of iron superoxide dismutases from human



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

parasites and a statistical coupling analysis of metal binding specificity. **Proteins**, v. 77, n. 1, p. 26-37, 2009. doi: 10.1002/prot.22412.

PG106

Busca e caracterização de inibidores da enzima diadenilato ciclase de *Staphylococcus aureus*

MENEGHELLO, R.¹; NAVARRO, M. V. A. S.¹

raphael.meneghello@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Recentemente, uma molécula baseada em nucleotídeos, a adenosina dimérica cíclica (c-di-AMP), foi identificada em várias bactérias patogênicas, ganhando rapidamente o status de um sinalizador central no controle de diversos processos bacterianos essenciais, tais como transporte iônico e vigilância a danos no DNA. (1) Em *Staphylococcus aureus*, é sintetizado pela enzima adenilato ciclase DacA (Sa_DacA), e verificou-se que o c-di-AMP é essencial para homeostase da parede celular e resistência aos estresses ambientais. (2) Dada a importância desse segundo mensageiro para a sobrevivência da bactéria, e o conhecimento de infecções provocadas por cepas super-resistente à antibióticos (3), o projeto visa a implementação de ensaios em larga escala para identificação de inibidores específicos dessa enzima usando diferentes bibliotecas de compostos. Em um primeiro teste de busca utilizando a biblioteca NDL (Natural Derivatives Library - Timtec), que contém 3040 moléculas derivadas de compostos naturais, foram encontrados 14 hits que diminuíram a atividade da Sa_DacA. Ensaios de confirmação desses hits serão realizados e os candidatos positivos serão avaliados quanto à força e mecanismo de inibição. Prevê-se ainda a determinação estrutural de complexos enzima-inibidor para compreensão dos determinantes de reconhecimento molecular. Ensaios *in vivo* serão implementados para avaliação das atividades bactericidas ou bacteriostáticas dos inibidores identificados em cepas super-resistentes de *S. aureus*. Os resultados gerados nesse projeto podem servir de base para estudos futuros e desenvolvimento de novos antibióticos, que em combinação com os tratamentos atualmente disponíveis pode levar ao controle das infecções até mesmo das formas mais resistentes de *S. aureus*.

Palavras-chave: Diadenilato ciclase. High throughput screening. *Staphylococcus aureus*.

Referências:

- 1 WITTE G. et al. Structural biochemistry of a bacterial checkpoint protein reveals diadenylate cyclase activity regulated by DNA recombination intermediates. **Molecular Cell**, v. 30, n. 2, p. 167-178, 2008. doi: 10.1016/j.molcel.2008.02.020.
- 2 CORRIGAN R.M. et al. c-di-AMP is a new second messenger in *Staphylococcus aureus* with a role in controlling cell size and envelope stress. **PLOS Pathogens**, v. 7, n. 9, p. e1002217-1-e1002217-16, 2011. doi: 10.1371/journal.ppat.1002217.
- 3 CORRIGAN R. M.; GRÜNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology**, v. 11, n. 8, p. 513-524, 2013. doi: 10.1038/nrmicro3069.

PG107

Remoção de ruídos de origem biológica em espectroscopia por ressonância magnética através de filtros baseados em transformadas wavelet

MENEZES, L. P.¹; PAIVA, F. F.¹

leon.menezes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A espectroscopia por ressonância magnética é utilizada clinicamente para detectar e estimar a concentração de metabólitos de interesse para diagnósticos. Para garantir a qualidade e confiabilidade dos resultados, é necessário que o ruído presente no sinal coletado seja minimizado. Além do ruído de origem instrumental, ao realizar medidas em uma amostra *in vivo* é necessário lidar com interferências causadas pela própria no sinal, devido a sua possível movimentação e a processos fisiológicos. Essa parcela de ruído é difícil de ser identificada, pois afeta de forma não aleatória a porção do sinal adquirido com alta relação sinal-ruído, podendo desta forma introduzir erros na quantificação do espectro sem que este aparente estar visivelmente contaminado. (1) Para sua detecção, foi implementada na linguagem Python uma análise sobre o comportamento estatístico do ruído, que em princípio deveria seguir uma distribuição normal na ausência de componentes de origem biológica. Esta distribuição é caracterizada por ter o terceiro e o quarto momentos estatísticos (obliquidade e curtose, respectivamente) nulos, e pôde-se dessa forma estabelecer um critério quantitativo para indicar a presença de ruído determinístico no sinal. O método de detecção mostrou-se eficaz em simulações computacionais dos sinais estudados. Uma vez detectado o ruído e buscando suprimi-lo, foi implementado um filtro baseado na decomposição e limiarização dos coeficientes de transformadas wavelet aplicadas ao espectro. (2) A performance desse filtro está sendo validada, estudando-se criteriosamente os parâmetros para otimizar a remoção de componentes de ruído sem eliminar parte do sinal ou introduzir-lhe artefatos. Uma vez certificada a eficiência do filtro, poderemos fazer uma comparação de resultados com outros métodos de filtragem em sinais simulados e sinais adquiridos *in vivo*. Poderemos então chegar à conclusão sobre a eficiência dos algoritmos desenvolvidos neste projeto.

Palavras-chave: Processamento de sinais. Espectroscopia por ressonância magnética. Ruídos de origem biológica.

Referências:

- 1 SLOTBOOM, J. et al. Reliability testing of *in vivo* magnetic resonance spectroscopy (MRS) signals and signal artifact reduction by order statistic filtering. **Measurement Science and Technology**, v. 20, n. 10, p. 104030-1-104030-14, 2009.
- 2 CANCINO-DE-GREIFF, H. F.; RAMOS-GARCIA, R.; LORENZO-GINORI, J. V. Signal de-noising in magnetic resonance spectroscopy using wavelet transforms. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 14, n. 6, p. 388-401, 2002.

PG108

Isothermal compressibility and thermal coefficient for a trapped Bose gas across the phase transition

MERCADO-GUTIERREZ, E.¹; CASTILHO, P.C.M.¹; PEDROZO-PENAFIEL, E.¹; FARIAS, K.M.¹; BAGNATO, V.S.¹

emmanuel.dv@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In this work, we use a experimental system to produce a Bose-Einstein Condensate (BEC) of ^{87}Rb . We implement the global variables approach to determinate experimentally the behavior on the phase transition, from thermal regime to condensate regime. In this form, we measure the thermodynamic susceptibilities such as the isothermal compressibility parameter κ_T and thermal coefficient α_T . We obtain the BEC which was made using laser and evaporation cooling technique into ^{87}Rb gas in a hybrid trap (magnetic trap + dipole trap). Considering the two regimes, the thermal part in which the temperature is above the critical temperature $T_c \propto \lambda_{dB}^2$ of the system, and the condensate part correspond to below T_c the critical temperature. We demonstrate that the behavior κ_T around the critical pressure, revealing the second-order nature of the phase transition.(1) We are trying to determine the thermal coefficient for a Bose gas across the phase transition using the same treatment as was used for calculate the isothermal compressibility parameter, considering that the behavior of the thermal part would match with classical behavior for this coefficient. On the other hand we want to know what the thermal behavior due the volume changes of the condensate part for describe the thermodynamics of ultra-cold inhomogeneous gases.

Keywords: Isothermal compressibility. Thermal coefficient. Bose-Einstein condensate.

Referências:

1 POVEDA-CUEVAS, F. J. et al. Isothermal compressibility determination across Bose-Einstein condensation. **Physical Review A**, v. 92, n. 1, p. 013638, 2015. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.92.013638>.

PG109

Estudo da correlação estrutura-função da única di-adenilato ciclase de *Staphylococcus aureus* resistente à metilicina (MRSA) - um novo alvo farmacológico.

MESQUITA, N. C. M. R.¹; MENEGHELLO, R.¹; BASSOS, L. G. M.²; NAVARRO, M. V. A. S.¹

nathy_physics@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

Staphylococcus aureus, uma bactéria patogênica oportunista, tem sido responsabilizada por diversas infecções humanas. Dentre as diversas linhagens bacterianas infectantes destaca-se a *Staphylococcus aureus* resistente à metilicina (MRSA), a qual é particularmente difícil de ser tratada devido à sua resistência a antibióticos comerciais. Por conseguinte, a busca por novos agentes farmacológicos tem-se mostrado necessária e emergente. Assim sendo, a descoberta de uma nova molécula de sinalização bacteriana, o c-di-AMP, essencial às diversas espécies patogênicas por ser reguladora central de processos fisiológicos celulares, deu início ao estudo de novos alvos farmacológicos: as di-adenilato ciclasas. Em *Staphylococcus aureus*, existe uma única di-adenilato ciclase (Sau_DacA), ancorada à membrana celular, capaz de sintetizar o c-di-AMP a partir de duas moléculas de ATP. (1) A Sau_DacA conserva todos os elementos essenciais de uma di-adenilato ciclase e por ser única desse organismo apresenta-se como excelente alvo de estudos para novos fins terapêuticos. Através de uma série de ensaios, estruturais, calorimétricos, espectroscópicos e bioquímicos, aliados a mutações sítio-dirigidas, identificou-se a relevância de uma conformação dimérica destas proteínas, assim como a importância dos motivos conservados DGA e RHR para a atividade da Sau_DacA. Um loop flexível na região entre o sítio ativo e a interface dimérica foi observado em duas conformações distintas, quando ligado e não-ligado ao ATP, e em conjunto com os dados obtidos para mutantes sítio-dirigidos da interface dimérica mostrou que esta interface é essencial para a estabilidade conformacional e térmica da proteína funcionalmente ativa. Nossos resultados aliados a dados disponíveis na literatura possibilitaram a proposição de um mecanismo de síntese de c-di-AMP que deve ocorrer via encontro *face-to-face* de dois sítios de ligação de ATP presentes em dímeros protéicos distintos, podendo ter interferência na taxa de síntese da molécula sinalizadora através de interação proteína-proteína com uma denominada YbbR. Desta forma, contribuimos para uma melhor compreensão da estrutura apresentada pela Sau_DacA e da função exercida pela mesma, auxiliando no uso da Sau_DacA como alvo para o desenvolvimento de novos fármacos, tendo em vista os processos celulares aos quais o c-di-AMP encontra-se relacionado. (2,3) Logo, a extinção da síntese de c-di-AMP inibiria consequentemente a ocorrência de diversas vias celulares controladas por c-di-AMP levando, assim, as células bacterianas à morte celular.

Palavras-chave: Di-adenilato ciclase. *Staphylococcus aureus*. Resistência bacteriana.

Referências:

- 1 CORRIGAN, R. M.; GRÜNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology**, v. 11, n. 8, p. 513-524, 2013.
- 2 WITTE, G. et al. Structural biochemistry of a bacterial checkpoint protein reveals diadenylate cyclase activity regulated by DNA recombination intermediates. **Molecular Cell**, v. 30, n. 2, p. 167-178, 2008.
- 3 MEHNE, F. M. et al. Cyclic di-AMP homeostasis in bacillus subtilis: both lack and high level accumulation of the nucleotide are detrimental for cell growth. **Journal of Biological Chemistry**, v. 288, n. 3, p. 2004-2017, 2013.

PG110

Spontaneous symmetry breaking: Monte Carlo study comparing Metropolis and worm algorithm

MIGLORIA, A.¹; MENDES, T.¹

alexandre.migloria@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The study of symmetry is very important for the understanding of the Standard Model of particle physics, which describes the fundamental interactions between elementary particles. This study includes especially the understanding of the cases in which there is symmetry breaking. First, we study theoretical examples of spontaneous symmetry breaking. Next, we relate the above theoretical study to practical examples of symmetry breaking in different areas of physics, as in gauge theories (Higgs mechanism), classical mechanics and statistical physics (spin models). (1) Finally, we make an application on the computer. In particular, we make a simulation of the two-dimensional Ising model, which explains the presence of spontaneous magnetization in ferromagnetic materials below the critical temperature and the quantum theory of scalar field with self interaction ϕ^4 , which is invariant under any Lorentz transformation and the quanta of the quantized scalar field are spin-zero particles, and as such are bosons. The only fundamental scalar field that has been observed in nature is the Higgs field. We use the so-called Monte Carlo method. (2) This allows us generate a number of typical configurations for the system at a given temperature. We compare the traditional Metropolis algorithm and the more recent worm algorithm, which comes from a high-temperature expansion of the partition function. (3)

Keywords: Monte Carlo method. Statistical physics. Ising model.

Referências:

- 1 SALINAS, S. R. A. **Introdução à física estatística**. São Paulo: EDUSP, 1999. 464 p.
- 2 GIORDANO, N. J.; NAKANISHI, H. **Computational physics**. 2nd ed. São Paulo: Pearson/Prentice Hall, 2006. 544 p.
- 3 PROKOF, N.; SVISTUNOV, B. Worm algorithms for classical statical models. **Physical Review Letters**, v. 87, n. 16, p. 160601-1-160601-4, 2001.

PG111

Influence of the laser pulse width on nonlinear refractive index of organic solvents measured by nonlinear ellipse rotation

MIGUEZ, M. L.¹; BARBANO, E. C.¹; ZILIO, S. C.¹; MISOGUTI, L.¹

maria.miguez@usp.br, malumiguez@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

It is well known that nonlinear refractive index, n_2 , can arise from different third-order nonlinear processes such as ultrafast electronic and slow orientational, for instance. In general, organic solvents present both, electronic and orientational nonlinearities, which need to be discriminated to be correctly characterized. The common approach relies on the use of complicated time resolved methods, but here, we propose to use a single beam nonlinear ellipse rotation (NER) method. In order to get the contribution of slow orientational nonlinearities, we change the pulse width since we expect that such nonlinear effects give the predominant contribution for the NER signal for long pulses. This study is possible to be done due to development of a new technique to determine the NER signal using a dual phase lock-in. (1) In this new technique, we demonstrated that it is possible to measure the NER signal with high sensitivity, precision, low noise, simplicity, and with good potential for discriminate different type of nonlinearities. Also, it is possible to measure any type of samples, thin or thick, condensed or gaseous media. (2) The NER signal is a type of Kerr nonlinearity similar to self-phase modulation, cross-phase modulation, and self-focusing, for example. As sample, we have used a silica cuvette with 2 mm pathway filled with different organic solvents. Using the thick sample condition, where we are able to discriminate the NER signal arising from the silica (cuvette wall) and the solvent, and in this way, we can use the silica signal as a reference in order to measure the solvent nonlinearity in a single scan. This procedure can be adopted since silica presents only a pure electronic nonlinearity, which is a constant independently of the pulse width. On other hand, organic solvents also have contribution from slow orientational nonlinear refractive indices, which normally grow as the pulse width increase. Using amplified pulses from a laser system (Dragon, K&M Labs) at 800 and 1 Hz repetition rate, we tuned the pulse width from 40 fs up to 2 ps by controlling the pulse compression. We observed that the NER signals of organic solvents grow as the pulse width increase indicating the contribution of strong orientational effect, which agrees with one observe in the literature. (3) It is worth to mention that even without using any complicated time resolved method; we were able to infer the contribution of two types of nonlinearities indices of refraction in several organic solvents.

Keywords: Nonlinear ellipse rotation. Organic solvents. Nonlinear processes.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Accurate measurement of nonlinear ellipse rotation using a phase-sensitive method. **Optics Express**, v. 22, n. 21, p. 25530, 2014. doi: 10.1364/OE.22.025530.

2 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; COURA, J. A.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied Physics B**, v. 120, n. 4, p. 653-658, 2015. doi: 10.1007/s00340-015-6178-x.

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

PG112

Evolução temporal de uma quase-partícula

MIKUNI, V. M.¹; OLIVEIRA, L. N.¹

vinicius.mikuni@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um efeito físico abordado na literatura corresponde ao efeito Seebeck. (1) Esse efeito refere-se ao fenômeno o qual uma diferença de temperatura em um material gera uma diferença de potencial e, por conseguinte, uma corrente elétrica. Este efeito pode ser utilizado na construção de refrigeradores com maior eficiência do que os que são utilizados hoje. A eficiência de um material em produzir energia termoelétrica é proporcional ao quociente da condutividade elétrica pela condutividade térmica. Por esta razão, para uma melhor eficácia, um material que possua como característica ser um bom condutor elétrico e mau condutor térmico é desejado. Materiais que apresentam esta característica apresentam uma estrutura cúbica de corpo centrado. Este projeto está interessado em tratar o problema 1-D, utilizando como modelo um átomo central que pode oscilar entre duas posições específicas entre duas placas. A oscilação do átomo central é causada por excitações provocadas por fônons, sendo que tais excitações modificam a condutância do material. A condutância devido a este efeito será calculada utilizando-se métodos computacionais para diagonalização do hamiltoniano que descreve o sistema.

Palavras-chave: Quase-partícula. Seebeck. Condutância.

Referências:

1 SEEBECK, T. J. Ueber die magnetische polarisation der metalle und erze durch temperatur-differenz. **Annalen der Physik und Chemie**, v. 82, n. 2, p. 133-160, 1826.

PG113

Efeito bioestimulador do LED de baixa potência na produção de anticorpos monoclonais

MION, W.¹; SOUZA, A. V. G.¹; OLIVEIRA, J. C. V.¹; GOLIM, M. A.¹; INADA, N. M.²; BAGNATO, V. S.²; DEFFUNE, E.¹; GUIMARÃES, F. E. G.²

wonermion@ifsc.usp.br

¹Universidade Estadual Paulista - UNESP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

O crescente uso de anticorpos monoclonais (mAbs) em processos diagnósticos e terapêuticos tem fomentado o desenvolvimento da indústria de biotecnologia a procurar novas tecnologias para melhorar a biodisponibilidade da produtividade dos mAbs. (1,2) O uso crescente da luz como agente bioestimulador de processos celulares vem ganhando notoriedade entre os pesquisadores. Efeitos como aumento na taxa de proliferação celular, ampliação da taxa de produção de fibroblastos, síntese de colágenos, RNA e DNA (3), são regularmente descritos na literatura. Este trabalho buscou avaliar o emprego do LED na produção de anticorpos monoclonais com vistas a oferecer uma nova opção para empresas de biotecnologias. Utilizou-se duas linhagens de hibridomas secretores de anticorpos monoclonais anti-PBp2a. Os Hibridomas MRSA 3-75 e MRSA 4-27 foram cultivados em placas de cultura de 24 poços supridos de meio de cultura RPMI livre de fenol com 10% de SFB e com $2,5 \times 10^5$ células/poço. As culturas foram segregadas em seis grupos G1: Sham (não irradiado); G2: 1 J/cm²; G3: 3 J/cm²; G4: 5 J/cm²; G5: 10 J/cm²; G6: 20 J/cm². As culturas foram irradiadas com auxílio da mesa difusora BioTable constituídas por LEDs no comprimento de onda de 450 nm $\pm$ 20 nm com potência média de 35 mW/cm² de emissão contínua. Verificou-se as taxas de viabilidades das células por Citometria de fluxo e MTT (3-(4,5-dimethyl thiazol-2-yl)-2,5-diphenyl tetrazolium bromide), o perfil secretor de anticorpos monoclonais dos hibridomas por teste ELISA e NanoDrop e taxa crescimento celular por Hemocitômetro 24 horas após irradiação durante 5 dias consecutivos. Os resultados mostraram que o grupo G2 teve bioestimulação de 31 % na produção de mAbs para o hibridoma MRSA 4-27 em relação ao grupo G1, não obstante, o mesmo efeito não foi observado para o hibridoma MRSA 3-75. Os grupos G3 e G4 não apresentaram diferenças significativas e os grupos G5 e G6 houve bioinibição na secreção de mAbs para ambos hibridomas. O crescimento celular não foi significativo entre os grupos G1 e G2 e G3 para os dois hibridomas, para os demais grupos irradiados houve diminuição do crescimento celular. O emprego da luz na produção de anticorpos monoclonais desperta interesse como agente bioestimulador potencializando a capacidade produtiva dos monoclonais podendo gerar um impacto competitivo do mercado de hibridomas.

Palavras-chave: Biotecnologia. Produção de mAbs. LED.

Referências:

1 COSTA, A. R.; RODRIGUES, M. E.; HENRIQUES, M.; AZEREDO, J.; OLIVEIRA, R. Guidelines to cell engineering for monoclonal antibody production. **European Journal of Pharmaceutics and**

Biopharmaceutics, v. 74, n. 2, p. 127-138, 2010. doi: 10.1016/j.ejpb.2009.10.002.

2 SHUKLA, A. A.; THOMMES, J. Recent advances in large-scale production of monoclonal antibodies and related proteins. **Trends in Biotechnology**, v. 28, n. 5, p. 253-261, 2010. doi: 10.1016/j.tibtech.2010.02.001.

3 KARU, T. Photobiological fundamentals of low-power laser therapy. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 23, n. 10, p. 1703-1717, 1987. doi: 10.1109/JQE.1987.1073236.

PG114

Estudo da interação de zeínas com membrana celular utilizando microscopia confocal

MIRANDA, M. M. P.¹; GUIMARÃES, F. E. G.¹

messiasmpm@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A tecnologia de engenharia de tecidos atualmente tem utilizado aplicação de biopolímeros tais como as proteínas naturais, em sistemas coloidais; para reconhecer células-alvo em tecido específico. Pois os veículos coloidais são de alta disponibilidade e são biodegradáveis, com alta capacidade de ligação de drogas, e disponibilidade de grande área de superfície para acoplar moléculas e células, viabilizando a liberação controlada de fármacos nos tecidos. Os sistemas poliméricos de liberação de drogas são amplamente utilizados, permitem uma liberação lenta e gradual do ingrediente ativo e possibilitam o direcionamento a alvos específicos do organismo. (1) Dentro os mecanismos de investigação da veiculação de fármacos utilizando sistemas coloidais, a microscopia confocal dependente do tempo, foram obtidas micrografias de heparina carregado filmes zeína microesferas e suas interações com as células do sangue. Características de películas de zeína de microesferas carregadas com heparina em diferentes ampliações e morfologia dos filmes de zeína foram identificadas por microscopia confocal por correlação de fótons. (2) Este projeto tem objetivo de caracterizar a interação da zeína com a membrana celular para aplicação em liberação de drogas. Utilizando técnicas de microscopia confocal, por localização dependente de tempo e medidas de correlação de fótons.

Palavras-chave: Sistemas coloidais. Correlação fluorescência. Complexo enzimático.

Referências:

- 1 MÜLLER, V. et al. Preparation and characterization of zein and zein-chitosan microspheres with great prospective of application in controlled drug release. **Journal of Nanomaterials**, v. 2011, p. 928728-1-928728-6, 2011. doi: 10.1155/2011/928728 .
- 2 PALIWAL, R.; PALAKURTHI, S. Zein in controlled drug delivery and tissue engineering. **Journal of Controlled Release**, v. 189, p. 108-122, 2014. doi: 10.1016/j.jconrel.2014.06.036.

PG115

Hydrolytic and transfructosylating activity of a Beta - Fructofuranosidase from *Bifidobacterium adolescentis* ATCC 15703

MONSALVE-MERA, A.¹; LIMA, M.¹; MUNIZ, J.R.C.¹; POLIKARPOV, I.¹

alainmonsalmvera@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

FOS are polymers in which fructosyl units (F) are bound at the position beta (2-1) of sucrose (GF). Traditionally, they have been defined as the combination of three sugars 1 kestose (GF2), nystose (GF3) and fructofuranosylnystose (GF4). (1) Being FOS non-digestible sugars, they are not degraded or adsorbed at the stomach or in the small intestine; they reach the colon intact promoting the proliferation of *Bifidobacteria*, which constitutes a great part of the intestinal micro flora, and in this way FOS are considered as excellent prebiotic. Due to its low colorimetric value, low carcinogenic, low glycemic index and moderate sweetness properties, FOS are the most commonly used prebiotic fibers in the production of functional foods formulations. (2) One of the way to produce this fructan is through the transfructosylating activity of beta-fructofuranosidases (beta-FFase), principally from *Aspergillus* gender, using sucrose as substrate. Our aim is to perform the enzymatic characterization of a beta-FFase of *Bifidobacterium adolescentis* ATCC 15703. We found that the optimum pH and temperature was 6 and 50 °C, respectively. The enzyme remained stable till 50 °C, when it was maintained at different temperatures for 1 hour, and then was performed the standard reaction. We also evidenced that the maximum transfructosylating activity was attained after 6h of reaction, using sucrose as substrate with 30.2 nM of beta-FFase and 50 mM of sucrose.

Keywords: Beta-fructofuranosidase. *Bifidobacterium adolescentis* ATCC 15703. Transfructosylating activity.

Referências:

- 1 Qiangsheng, X. et al. Purification and biochemical characterization of a novel beta fructofuranosidase from *Penicillium oxalicum* with transfructosylating activity producing neokestose. **Process Biochemistry**, v. 50, n. 8, p. 1237-1246, 2015. doi: 10.1016/j.procbio.2015.04.020.
- 2 RODRIGUEZ-GÓMEZ, R. et al. Improved sample treatment for the determination of fructooligosaccharides in milk related products by liquid chromatography with electrochemical and refractive index detection. **Talanta**, v. 144, p. 883-889, 2015. doi: doi:10.1016/j.talanta.2015.07.042.

PG116

Efeito da dimerização do peptídeo antimicrobiano Aureína 1.2 em sua atividade biológica avaliado por monocamadas de Langmuir

MONTANHA, E. A.¹; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹; NOBRE-PAVINATTO, T. M.¹; LORENZÓN, E. N.²; CILLI, E. M.²

erica.montanha@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de Araraquara - UNESP

Peptídeos antimicrobianos (PAMs) são componentes do sistema de defesa de primeira linha de muitas formas de vida. O amplo espectro de atividade e a rápida ação microbicida fazem com que os estudos com PAMs sejam cada vez maiores, evidenciando o alto potencial dessas moléculas. Vários mecanismos têm sido propostos para explicar o modo de ação dos PAMs, que envolvem, principalmente, a desestabilização da membrana celular dos microrganismos. Pesquisas mostraram que, independentemente do mecanismo de ação, a agregação/oligomerização dos PAMs é um pré-requisito. Levando isso em conta, vários PAMs foram dimerizados visando a uma melhora da atividade antimicrobiana e vantagens farmacotécnicas, como o aumento da solubilidade e a resistência frente a proteases. Porém, o efeito da dimerização na atividade biológica não é claro, já que algumas versões diméricas não apresentaram maior atividade, ou foram muito tóxicas. Neste trabalho será investigada a interação do PAM Aureína 1.2, na forma de monômero e dímero, com modelos de membrana celular, constituídos por filmes de Langmuir, com o objetivo de identificar seus mecanismos de ação. As monocamadas de Langmuir são formadas pelo espalhamento de um material anfifílico e insolúvel na interface ar-água, como por exemplo, um lipídeo. (1) Com a compressão deste filme nanoestruturado por barreiras móveis, pode-se simular diferentes estágios de compactação de uma membrana, cujas propriedades mecânicas e elétricas podem ser inferidas através de medidas de pressão e potencial de superfície. Buscar-se-á determinar como tais compostos afetam as propriedades do filme de Langmuir, que serão constituídos de extratos lipídicos reais de bactérias Gram-positivas e Gram-negativas. Os resultados serão relacionados entre si, na busca do candidato com melhor potencial terapêutico, que possivelmente exerce maiores efeitos sobre a membrana.

Palavras-chave: Monocamadas de Langmuir. Peptídeo antimicrobiano. Membrana celular.

Referências:

1 LANGMUIR, I. The constitution and fundamental properties of solids and liquids. II. Liquids. **Journal of American Chemical Society**, v. 39, n. 9, p. 1848-1906, 1917.

PG117

Uso e proposta de uma técnica em ressonância magnética nuclear para estudar a migração de moléculas de um fluido num meio poroso

MONTRAZI, E. T.¹; D'EURYDICE, M. N.¹; FORTULAN, C. A.²; BONAGAMBA, T. J.¹

elton.montrazi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de São Carlos - USP

O experimento chamado de $T_2 \times T_2$ exchange é uma poderosa ferramenta no estudo da dinâmica de fluidos num meio poroso (1), contudo, na sua versão bidimensional é necessário muito tempo para ser realizado. Para reduzir esse tempo o grupo propostos uma versão unidimensional do experimento na qual o primeiro estágio deste é utilizado como um filtro de T_2 . Em um trabalho anterior foi validado o experimento 1D proposto comparando ao resultado da versão 2D. (2) Nesse trabalho agora é mostrado a consistências das curvas de troca usando uma série de filtros T_2 . O experimento foi realizado em uma cerâmica de alumina saturada com água, a qual foi manufaturada com três diferentes distribuições de tamanhos de poros. (3) As características da cerâmica foram observadas com microscopia eletrônica de varredura e porosimetria por intrusão de mercúrio. Diferentes valores de filtros T_2 foram escolhidos variando o número de pulsos de 180° da primeira CPMG enquanto a dinâmica de troca e o processo de relaxação dos três sítios foram obtidos variando o tempo de armazenagem. Através do ajuste simultâneo das curvas de troca para os três sítios em função do tempo de armazenagem foram obtidos as taxas de trocas e as taxas de relaxações. Esses valores foram comparados aos resultados 2D e as taxas de relaxações obtidas dos mapas $T_1 \times T_2$ e demonstram excelente concordância validando tanto os modelos teóricos como experimentais. Assim, conclui-se que a versão 1D fornece os mesmo resultados de taxa de troca e relaxações de forma mais rápido que a versão 2D e, desta forma, a versão 1D $T_2 \times T_2$ pode ser utilizada nas ferramentas well-logging de perfilagem.

Palavras-chave: RMN. Meios porosos. $T_2 \times T_2$ exchange.

Referências:

1 DORTCH, D. R.; HORCH, E. A.; DOES, M. D.. Development, simulation, and validation of nmr relaxation-based exchange measurements. **The Journal of Chemical Physics**, v. 131, n. 16, p. 164502, 2009.

2 MONTRAZI, E. T.. Proposta de uma técnica unidimensional para o experimental $T_2 \times T_2$ exchange. In: JORNADA BRASILEIRA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA, 13, 2014, Pirenópolis - GO. **Mini-cursos em RMN** ... Rio de Janeiro: AUREMN, 2014.

3 SILVEIRA, Z. C. et al. Ceramic matrices applied to aerostatic porous journal bearings: material



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

characterization and bearing modeling. **Cerâmica**, v. 56, n. 338, p. 201-211, 2010.

PG118

Biophysical characterization of the 1-Delta-Pyrroline-5-Carboxylate Dehydrogenase from *Trypanosoma cruzi*

MORAES, A. R.¹; MANTILLA, B. S. Mantilla²; MARTIL, D.E.¹; SILBER, A. M.²; THIEMANN, O. H.¹

arfk.moraes@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Ciências Biológicas - USP

Chagas disease afflicts the population present in countries of emergent and poor economy of America and belongs to the same group as Sleeping Sickness and the leishmanias, classified by the World Health Organization as neglected tropical diseases. Chagas disease is caused by the flagellated parasite *Trypanosoma cruzi* that has a complex life cycle, going from an invertebrate host to a vertebrate one. In order to survive and proliferate in these host changes, *T. cruzi* must adapt itself to osmotic and oxidative stress, changes in the environment composition and changes in energy sources. (1) To this adaptation, the amino acid L-proline has a prominent role, playing important and essential participation that affect the protozoan life cycle such as the mitochondrial metabolism, the host-cell invasion and metacyclogenesis. (2) *T. cruzi* 1-Delta-Pyrroline-5-Carboxylate Dehydrogenase (TcP5CDH) is involved in the catabolism of proline holding a major role in the conversion of Pyrroline-5-Carboxylate to L-glutamate and, thus, shows itself as a possible molecular target for new drug development. (3) This work aims at the molecular characterization of TcP5CDH by biophysical techniques such Dynamic Light Scattering, Circular Dichroism and X-ray Crystallography. A homologous modeling was performed using Modeller 9.14 with PDB proteins from *Homo sapiens*, *Mus musculus*, *Saccharomyces cerevisiae* and *Bacillus tuberculosis*; structures with sequence identity >40% and coverage >90% were chosen. The recombinant TcP5CDH cloned in pET28a vector was obtained from *E. coli* CodonPlus strain and purified by affinity chromatography and size exclusion chromatography (16/60 Sephacryl S-500) to remove any remaining contaminants. DLS was performed with 0.50, 0.75, 1.5 and 3.0 mg/ml of TcP5CDH and revealed an apparent hydrodynamic radius compatible with a trimeric organization. At 3.0 mg/ml a tetramer/hexamer is observed with a hydrodynamic radius estimated as approximately between 120 and 180 nm respectively.

Keywords: *Trypanosoma cruzi*. 1-Delta-Pyrroline-5-Carboxylate Dehydrogenase. Structural biology.

Referências:

1 DE SOUZA, W.. Basic cell biology of *Trypanosoma cruzi*. **Pharmaceutical Design**, v. 8, n. 4, p. 269-285, 2002. doi: 10.2174/1381612023396276.

2 PAES, L.S.et al. Proline dehydrogenase regulates redox state and respiratory metabolism in *Trypanosoma cruzi*. **PLoS ONE**, v. 8, n. 7, p. e69419, 2013. doi: 10.1371/journal.pone.0069419.

3 MANTILLA, B.S. et al. Role of 1-Delta-pyrroline-5-carboxylate dehydrogenase supports mitochondrial metabolism and host-cell invasion of *Trypanosoma cruzi*. **Journal of Biological Chemistry**, v. 290, n. 12, p. 7767-7790, 2015. doi: 10.1074/jbc.M114.574525.

PG119

Sequências de pulsos no estado estacionário para caracterização rápida de produtos em baixa resolução

MORAES, T. B.¹; DANIELI, E.²; BLUMICH, B.²; COLNAGO, L. A.³

tiago.moraes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²RWTH Aachen University - Aachen, Germany

³Embrapa Instrumentação - CNPDIA

Sequências de pulsos no estado estacionário ou equilíbrio dinâmico são baseadas na aplicação periódica de pulsos espaçados por um tempo muito menor que os tempos de relaxação. Após um tempo transiente, a magnetização estabelece um estado estacionário com uma dependência complexa com os parâmetros experimentais. Inúmeros métodos baseados nessas sequências possibilitam a obtenção dos tempos de relaxação, incluindo a razão T_1/T_2 . O experimento padrão para obtenção da razão T_1/T_2 é bi-dimensional, possuindo um tempo experimental consideravelmente alto. A determinação rápida da razão T_1/T_2 pode ser obtida através das sequências no estado estacionário, que se apresentam como uma forte alternativa na caracterização de produtos e processos. Neste trabalho, apresentamos resultados recentes obtidos com as técnicas DECPMG Driven-Equilibrium Carr-Purcell-Meiboom-Gill, Split 180 e CWFP_{x-x}(1-2). Essas sequências de pulsos são uni-dimensionais, e permitem a obtenção dos tempos de relaxação em campos magnéticos de diferentes homogeneidades. Experimentos foram realizados no espectrômetro KEA, em magnetos com 0,7 T (Halbach magnet) e 0,2 T (MOUSE-NMR). Amostras com razão T_1/T_2 conhecidas foram utilizadas na caracterização das sequências de pulso em diferentes condições experimentais, como offset de frequência e τ_1 e τ_2 tempos.

Palavras-chave: SSFP. DECPMG. CWFP.

Referências:

1 MITCHELL, J.; HURLIMANN, M.D.; FORDHAM, E.J., . A rapid measurement of T_1/T_2 : the DECPMG sequence. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 200, n. 2, p. 198, 2009. doi: 10.1016/j.jmr.2009.07.002.

2 FREED, D.E.; SCHEVEN, U.M.; HURLIMANN, M.D.. Split 180° sequence. **Journal for the Basic Principles of Diffusion Theory, Experiment and Application**, v. 10, p. 19.1-19.3, 2009.

PG120

Produção e estudos estruturais de heterocomplexos de septinas

MORAIS, S. T. B.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹

br.sinara@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Septinas são proteínas que ligam GTP e interagem entre si formando heterocomplexos, os quais formam filamentos e estruturas de maior nível de organização. Além de se mostrarem importantes durante a citocinese, tais filamentos podem estar envolvidos em outros processos celulares como determinação da polaridade celular e reorganização do citoesqueleto. Em humanos são encontrados 13 genes que codificam septinas, as quais se dividem em 4 grupos com base na similaridade de sua organização estrutural. Pouco se sabe sobre a estrutura dessas proteínas, em particular dos heterocomplexos, sendo o único complexo de septinas já caracterizado estruturalmente formado pelas septinas humanas 2, 6 e 7. (1) Análises filogenéticas realizadas usando sequências de septinas pertencentes a diferentes organismos levou a identificação de quatro septinas ortólogas no deuterostômio *Ciona intestinalis* as quais apresentam, cada uma delas, identidade com um dos quatro grupos de septinas descritos em mamíferos. (2, 3) Neste projeto, essas proteínas foram expressas e sua interação na forma de um heterocomplexo foi observada por co-purificação, sendo confirmada a presença das 4 septinas no complexo por Espectroscopia de Massa. Análises bioquímicas dessas proteínas isoladas como a determinação do teor de nucleotídeos e sua atividade GTPásica estão em andamento. Além disso, visando a caracterização deste novo complexo considerando a provável formação de filamentos, tem-se investido na produção *in vitro* deste, para determinação da posição das subunidades por meio de Microscopia Eletrônica de Transmissão.

Palavras-chave: Septinas. Coexpressão. Heterocomplexo.

Referências:

- 1 SIRAJUDDIN, M. et al. A structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature**, v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.
- 2 ZERAIK, A. E. et al. Septins of platyhelminths: identification, phylogeny, expression and localization among developmental stages of *Schistosoma mansoni*. **Plos Neglected Tropical Diseases**, v. 7, n. 12, p. e2602-1-e2602-14, 2014. doi: 10.1371/journal.pntd.0002302.
- 3 CAO, L. et al. Phylogenetic and evolutionary analysis of the septins protein family in metazoan. **FEBS Letters**, v. 581, n. 28, p. 5526-5532, 2007.

PG121

Pulchellin isoforms: endocytosis and cell transport

MOREIRA, H. H. T.¹; LOPES, J. L.¹; LUND, A. B.²; SANDVIG, K.²; ARAÚJO, A. P. U.¹

helinetm@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Institute for Cancer Research, The Norwegian Radium Hospital

Pulchellin is a heterodimeric toxin found in *Abrus pulchellus* seeds. It is a type 2 ribosome inactivating protein, which consists of a toxic A-chain linked to a sugar binding B-chain. (1) The B-chain mediates its binding to the galactose residues on the cellular membrane in a process that is then followed by an endocytic uptake. Once the A-chain reaches the cytosol it inhibits protein synthesis leading to cell death. (2) In order to explore the pulchellin isoforms II and IV (PII and PIV) cell entry mechanisms, we have monitored the pulchellin action in HeLa cells pre-treated with several drugs, targeting different endocytic and translocation routes. The protein synthesis inhibition results show brefeldin A protects cells against toxic effect of pulchellin, which indicates the pulchellin needs to be transported to Golgi to perform its toxic effect. When HeLa cells were incubated with glycosylation inhibitors, such as tunicamycin, swainsonine, puromycin and cycloheximidine, they were sensitized by Pulchellin, but at different rates for PII and PIV. When HeLa cells were incubated with PDMP and neuraminidase, PIV showed a reduced endocytosis rate compared with PII and control, indicating that PIV may require glycoconjugates and glycosphingolipids containing sialic acid to enter into the cells. Biophysical experiments using biomimetic membranes containing the ganglioside GM1 were performed to validate the differences between PII and PIV cell entry mechanism.

Keywords: Pulchellin. Endocytosis. Cell transport.

Referências:

1 CASTILHO, P. V.; GOTO, L. S.; ROBERTS, L. M.; ARAÚJO, A. P. U. Isolation and characterization of four type 2 ribosome inactivating pulchellin isoforms from *Abrus pulchellus* seeds. **FEBS Journal**, v. 275, n. 5, p. 948-959, 2008.

2 WOJEWÓDZKA, M. S.; SANDVIG, K. Ricin and ricin-containing immunotoxins: insights into intracellular transport and mechanism of action in vitro. **Antibodies**, v. 2, n. 2, p. 236-269, 2013.

PG122

Coherent interference between light scattered by cold strontium sample and reflected by an dielectric surface

MORIYA, P. H.¹; SHIOZAKI, R. F.¹; TEIXEIRA, R. C.¹; COURTEILLE, Ph. W.¹

paulohisao@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Light propagating in an optically thick sample experiences multiple scattering. It is now known that interferences alter this propagation, leading to an enhanced backscattering, a manifestation of weak localization of light in such diffuse samples. These effects, known as coherent backscattering (CBS), has been studied with classical scatterers (1) and observed for light in a variety of different media such as powder suspensions, biological tissues or Saturn's rings. Cold atoms trapped in magneto-optical traps are unique candidates to move the field of coherent multiple scattering to a quantum regime (2) (quantum internal structure, wave-particle duality, quantum statistical aspects). The achievements of laser-cooling techniques in the past decade now allow one to manipulate and control a variety of different samples of quantum scatterers. When the backscattering effect cannot be produced because multiple scattering among the system of particles is negligible, we find that the introduction of an interface creates a peak in the retro-reflection direction. (3) This peak may be viewed as the result of the coherent interference between a ray first reflected and then scattered and the ray first scattered and then reflected. In this work, we report the experimental evidence for coherent interference between light in a laser-cooled gas of strontium atoms and reflected by a dielectric surface. Furthermore, we want to show that this kind of measurement can be used as tool to measure temperature of hot atomic clouds.

Keywords: Coherent effects. Backscattering. Strontium.

Referências:

- 1 TIGGELEN, B. A. van; LAGENDIJK, A.; TIP, A. Multiple-scattering effects for the propagation of light in 3D slabs. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 2, n. 37, p. 7653-7677, 1990.
- 2 LABEYRIE, G. et al. Coherent backscattering of light by cold atoms. **Physical Review Letters**, v. 83, n. 25, p. 5266-5269, 1999.
- 3 GREFFET, J. J. Backscattering of s-polarized light from a cloud of small particles above a dielectric substrate. **Waves in Random Media**, v. 1, n. 3, p. S65-S73, 1991. doi: 10.1088/0959-7174/1/3/006.

PG123

Metal-insulator-semiconductor capacitors based on P3HT-PVP for biosensing applications

MOURA, M. A.¹; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹

marcos.moura.fis@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Field-effect devices used to detect and identify biomolecules have been proposed as an alternative to electrochemical measurements in electrolyte-insulator-semiconductor (EIS) systems for biosensing. (1) This technology is wholly based on silicon, which makes fabrication expensive. There is now interest in organic electronics with which field-effect devices and metal-insulator-semiconductor (MIS) capacitors can be produced. (2) In this study, we analyze organic MIS capacitors to replace silicon chips. The capacitive MIS structure has Polythiophene (P3HT) as semiconductor and Polyvinylpyrrolidone (PVP) as insulator layer. This structure was spin coated on an Indium-Tin-Oxide (ITO) substrate followed by thermal treatment to eliminate solvents. The structures were completed with a gold layer by vacuum thermal evaporation. Devices with different areas were obtained to investigate the influence of geometrical parameters. The capacitors were analyzed using Capacitance-Voltage (CV) measurements compared with silicon MIS curves. The data analysis provides important information about depletion capacitance and flat-band voltage. We have also observed a strong effect of oxygen on the CV curve, thus suggesting a doping mechanism of P3HT, which may be exploited to obtain p-type semiconductors. This improved understanding paves the way to the fabrication of organic EIS devices. Our next step will be to immobilize biomolecules for a complete biosensing characterization. (3)

Keywords: MIS capacitors. Biosensing. Field-effect devices.

Referências:

- 1 SIQUEIRA JUNIOR, J. R. et al. Penicillin biosensor based on a capacitive field-effect structure functionalized with a dendrimer/carbon nanotube multilayer. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 25, n. 2, p. 497-501, 2009. doi: 10.1016/j.bios.2009.07.007.
- 2 LOPES, E. M. et al. Electrical characterization of poly(amide-imide) for application in organic field effect devices. **Organic Electronics**, v. 13, n. 10, p. 2109-2117, 2012. doi: 10.1016/j.orgel.2012.05.058.
- 3 SIQUEIRA JUNIOR, J. R. Incorporating a hybrid urease-carbon nanotubes sensitive nanofilm on capacitive field-effect sensors for urea detection. **Analytical Chemistry**, v. 86, n. 11, p. 5370-5375, 2014. doi: 10.1021/ac500458s.

PG124

Identificação e estudos moleculares, bioquímicos e estruturais de enzimas termofílicas do fungo *Thielavia terrestris* cultivado em bagaço de cana-de-açúcar

MULINARI, E. J.¹; SEGATO, F.²; MUNIZ, J. R. C.¹; POLIKARPOV, I.¹

evandro.mulinari@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de Lorena - USP

A degradação enzimática rápida, eficiente e robusta de polissacarídeos derivados de biomassa lignocelulósica é, atualmente, um grande desafio na produção de biocombustíveis e produtos químicos. Um pré-requisito é a disponibilidade de enzimas que hidrolisam celulose, hemicelulose e outros polissacarídeos que compõem a parede celular das plantas em açúcares fermentescíveis adequados para a utilização industrial. (1) Majoritariamente, celulasas e hemicelulasas utilizadas nos processos biotecnológicos e bioindustriais são produzidas por fungos do gênero *Trichoderma*, *Aspergillus* e *Penicilium*. Estas enzimas, geralmente, são estáveis em temperaturas pouco elevadas (entre 40 e 50 °C) e, dessa maneira, requerem um maior tempo de reação (horas ou até dias) para que a hidrólise da biomassa atinja uma porcentagem de sacarificação elevada, diminuindo a economicidade dos processos bioindustriais, além de tornar os biorreatores mais suscetíveis à contaminação microbiana. Uma alternativa para superar este obstáculo é aumentar a temperatura da reação. Para isso, faz-se necessário o desenvolvimento de enzimas que apresentem maior estabilidade térmica, diminuindo as chances de contaminação dos reatores, aumentando a taxa de hidrólise e reduzindo a viscosidade do meio. Dessa forma, objetiva-se, nesta proposta, investigar enzimas termofílicas e proteínas associadas à digestão do bagaço de cana de açúcar, provindas de fungos termofílicos, como o *Thielavia terrestris*. (2) A prospecção destas enzimas será abordada através da utilização de ferramentas de transcriptoma e secretoma, as quais contemplarão a formação de uma biblioteca enzimática. Através de estudos funcionais e estruturais das enzimas recombinantes obtidas usando técnicas de cristalografia de proteínas, intenta-se fornecer subsídios para o desenvolvimento de coquetéis enzimáticos mais eficazes para hidrólise do bagaço de cana-de-açúcar.

Palavras-chave: Biocombustível. Secretoma e Transcriptoma. Fungo termofílico.

Referências:

- 1 JORGENSEN, H.; KRISTENSEN, J. B.; FELBY, C. Enzymatic conversion of lignocellulose into fermentable sugars: challenges and opportunities. **Biofuels Bioproducts and Biorefining**, v. 1, n. 2, p. 119-134, 2007. doi: 10.1002/bbb.4.
- 2 BERKA, R. M. et al. Comparative genomic analysis of the thermophilic biomass-degrading fungi *Myceliophthora thermophila* and *Thielavia terrestris*. **Nature Biotechnology**, v. 29, n. 10, p. 922-927, 2011. doi: 10.1038/nbt.1976.

PG125

LiBELa: um método híbrido baseado na estrutura do ligante e receptor para docagem molecular

MUNIZ, H. dos S.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

heloisa.muniz@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Interações entre macromoléculas e ligantes são um tópico ainda em desenvolvimento, coberto por programas de docagem, os quais tem como a principal função auxiliar no desenvolvimento de novos fármacos. Como o objetivo normalmente é analisar a interação em milhares de complexos, é imprescindível uma boa harmonização entre o tempo computacional e a robustez dos métodos de cálculo em programas de docagem molecular. LiBELa (*Ligand Biding Energy Landscape*) é um programa de docagem que utiliza inicialmente as características estéricas e eletrostática de um ligante de referência (cristalográfico, por exemplo), obtendo uma melhor conformação inicial para o ligante testado e, em seguida, minimiza a energia de interação no receptor. (1) Além disso, as funções *score* são do tipo campo de força e se apresentam em 4 variações, compostas por potenciais de van der Waals, de Coulomb, e uma função empírica de solvatação de Stouten-Verkhivker como opcional. Pode-se usar os potenciais atenuados para permitir um maior grau de liberdade, uma vez que a flexibilidade do sistema é considerada apenas quando os confôrmeros dos ligantes são gerados. Os testes de enriquecimento mostraram uma superioridade de 30% e 15% nas bases de dados DUDE (2) e DUD (3), respectivamente, em comparação com um programa de docagem baseado puramente no receptor (DOCK 6.6), utilizando área sob a curva em escala semi-logarítmica como medida. Com o objetivo de investigar a consistência do método híbrido frente ao puro cálculo de similaridade, a docagem usando apenas a estrutura do ligante mostrou uma redução de 50% no enriquecimento de DUD. As funções de *score* atenuadas, apesar de sucesso em alguns outros casos, não mostraram nenhum ganho significativo em nosso programa quando comparado com o campo de força AMBER tradicional. Em conclusão, a informação estereoquímica enviesada a partir de um ligante de referência se mostrou uma ferramenta interessante para ser usada em conjunto com a estrutura da proteína no cenário do *docking*, dando resultados competitivos comparando a um programa de docagem tradicional.

Palavras-chave: Docagem molecular híbrida. Similaridade de ligante. Função de *score*.

Referências:

- 1 MUNIZ H. S.; NASCIMENTO A. S.. Ligand- and receptor-based docking with LiBELa.. **Journal of Computer-Aided Molecular Design**, v. 29, n. 8, p. 713-723, 2015. doi: 10.1007/s10822-015-9856-1.
- 2 MYSINGER M. M.et al. Directory of useful decoys, enhanced (DUD-E): better ligands and decoys for better benchmarking. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 55, n. 14, p. 6582-94, 2012. doi: 10.1021/jm300687e.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

3 HUANG N.; SHOICHET B. K.; IRWIN J. J.. Benchmarking sets for molecular docking.. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 49, n. 23, p. 6789-801, 2006. doi: 10.1021/jm0608356.

PG126

Functional and structural studies of *Bacillus licheniformis* carboxylesterases and its potential in the transformation of plant biomass

NAKAMURA, A. M.¹; POLIKARPOV, I.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

aline.nakamura@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Carboxylesterases are quite versatile enzymes, accepting a wide range of substrates while maintaining the region-, chemo- and enantioselectivity. This characteristic and the fact of, in general, carboxylesterases require no cofactor and are stable and active in many organic solvents, make these enzymes great candidates to biocatalysis in industrial processes. Furthermore, their functions have already been related in carbon source utilization (1), which may make them useful in the research for new renewable energy sources. Our group has already identified some esterases from *Bacillus licheniformis*, which will be the focus of this project. For one of these esterases we achieved some previous structural and functional results. The esterase open read frame was cloned and the recombinant plasmid was used to transform Rosetta expression strains. Then, the produced protein was purified by nickel affinity chromatography and by size exclusion chromatography. The esterase activity against p-nitrophenyl caprylate was determined by measuring the amount of p-nitrophenol released by esterase-catalyzed hydrolysis. The enzyme showed higher activity at 45°C and pH 7.0. When the amount of product released per minute per milligram of enzyme (specific activity) was measured for p-nitrophenyl caprylate and for a higher chain substrate, p-nitrophenyl laurate, the esterase showed an 8-fold higher activity for the smaller substrate. To elucidate de structure, crystallization screening by sitting-drop vapor-diffusion method was used. The crystal observed in the Pact Suite crystallization kit was subjected to X-ray diffraction, generating a 2.3 Å resolution data. The structure was solved by molecular substitution, which suggests a alfa/beta hydrolase fold, and the refinement is ongoing. We aim to continue the experiments for a better understanding of how this enzyme works, which may bring relevant information for biotechnology application.

Keywords: Esterase. Crystal structure. Biochemical characterization.

Referências:

1 BORNSCHEUER, U. T. Microbial carboxyl esterases: classification, properties and application in biocatalysis. **FEMS Microbiology Reviews**, v. 26, n. 1, p. 73-81, 2002. doi: 10.1016/S0168-6445(01)00075-4.

PG127

Aproximação de densidade local explorando a solução Bethe-Ansatz do modelo de Hubbard e a conexão adiabática

NARDI, L. M. C.¹; OLIVEIRA, L. N.¹

lucas.nardi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) tem tido enorme impacto em vários ramos da matéria condensada e da Química quântica. A DFT prevê a possibilidade de resolver um sistema quântico interagente e não homogêneo através da construção de um sistema quântico não interagente, conhecido como sistema Kohn-Sham, que possui a mesma densidade. Embora formalmente exata, a teoria depende de aproximações para um funcional da densidade, conhecido como funcional de exchange e correlação para aplicações práticas. A qualidade dessas aproximações limita a precisão dos cálculos. (1) Não obstante, o método não tem rival quando se trata de calcular a energia e a densidade eletrônica de sistemas periódicos e está entre os que oferecem melhor relação custo/precisão no cálculo da energia e densidade eletrônica de moléculas. Nosso projeto focaliza o modelo de Hubbard unidimensional não homogêneo. O mesmo modelo já foi estudado por meio da DFT com uma aproximação para o funcional da densidade extraída diretamente da solução Bethe-Ansatz para o modelo de Hubbard homogêneo. (2) Nós estamos procurando uma aproximação mais precisa para o funcional a partir da chamada conexão adiabática, que relaciona o sistema quântico interagente de interesse com o sistema de Kohn-Sham. Mais especificamente, a conexão adiabática é definida pela expressão matemática:

$$E[n] = \langle \psi_0 | T + V | \psi_0 \rangle + \int_0^1 \langle \psi_\lambda | U | \psi_\lambda \rangle d\lambda \quad (1)$$

onde 'T' e 'V' são as energias cinética e potencial do sistema Kohn-Sham com a densidade 'n' do sistema interagente, o integrando no último termo à direita é o valor esperado no estado fundamental para energia de interação 'U' em um sistema com interação ' λU '. O Hamiltoniano do modelo de Hubbard 1D é:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, s} (C_{i,s}^+ C_{j,s} + C_{j,s}^+ C_{i,s}) + U \sum_{i=1}^N (n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}) \quad (2)$$

Palavras-chave: Conexão adiabática. Hubbard unidimensional. DFT.

Referências:

- 1 ULLRICH, C. A. **Time-dependent density-functional theory: concepts and applications**. New York: Oxford University Press, 2012. 526 p.
- 2 LIMA, N. A.; SILVA, M. F.; OLIVEIRA, L. N.; CAPELLE, K. Density functional not based on the electron Gas: local-density approximation for a luttinger liquid. **Physical Review Letters**, v. 90, n. 14, p. 146402, 2003. doi: 10.1103/PhysRevLett.90.146402.

PG128

Chiral spin-orbital liquid with nodal lines

NARTORI, W. M. H.¹; PEREIRA, R. G.¹; MIRANDA, E.²

williannatori@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Física Gleb Wataghin - UNICAMP

Quantum spin liquids (QSLs) are strongly correlated spin systems that do not present magnetic order down to 0K. They have received both experimental and theoretical attention because of predicted unusual phenomena such as fractionalization, topological order, and gapless excitations in the absence of spontaneously broken symmetry. Although they are known to be the ground state of many model Hamiltonians, it is not yet possible to claim that they have been experimentally found, which underlines the importance of research on spin liquid states arising from realistic Hamiltonian models. Recent theoretical and experimental results focused the search for QSLs on compounds that display both strong electronic interaction and spin-orbit coupling. (1) Insulating rocksalt double ordered perovskites, where the magnetic ion has a $4d^1$ configuration, form a class of materials that presents these two characteristics. Moreover, a realistic spin-orbital model was already proposed to describe their magnetic phases, leading to a highly frustrated Hamiltonian. (2) Based on this facts, we proposed a chiral spin-orbital liquid as a stable phase in heavy-element double ordered perovskites compounds. By switching to a more convenient representation, we showed that the original model can be rewritten exactly as a Kugel-Khomskii Hamiltonian of pseudospins operators, with explicit $SU(2)$ and compass model symmetries. Making a mean field approximation that preserves these symmetries, we found out a quantum spin-orbital liquid state characterized by nodal lines along the edges of the Brillouin zone. We could show that this state is topologically non-trivial by proving that the nodal lines are topological defects in the reciprocal space. Dispersive surface states, whose localization depends upon the energy sign, were also found in open boundary conditions. Some experimental signatures of this state are discussed and compared with properties of the spin-liquid candidate Ba_2YMoO_6 . (3)

Keywords: Quantum spin liquid. Majorana fermions. Topological phases of matter.

Referências:

1 WITCZAK-KREMPA, W.; CHEN, G.; KIM, Y. B.; BALENTS, L. Correlated quantum phenomena in the strong spin-orbit regime. **Annual Review of Condensed Matter Physics**, v. 5, p. 57-82, 2014. doi: 10.1146/annurev-conmatphys-020911-125138.

2 CHEN, G.; PEREIRA, R.; BALENTS, L. Exotic phases induced by strong spin-orbit coupling in ordered double perovskites. **Physical Review B**, v. 82, n. 17, p. 17440-1-17440-25, 2010.

3 AHAREN, T. et al. Magnetic properties of the geometrically frustrated $S=1/2$ antiferromagnets,

$\text{La}_2\text{LiMoO}_6$ and Ba_2YMoO_6 , with the B-site ordered double perovskite structure. **Physical Review B**, v. 81, n. 22, p. 224409-1-224409-13, 2010.

PG129

Fluorescence lifetime spectroscopy for evaluation of photoaging process at sun exposed and non-exposed skin

NOGUEIRA, M. S.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹

marcelosaitonogueira@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Photoaging is the skin premature aging due to light exposure, which induces many tissue changes that range from wrinkled and discolored skin through to precancerous lesions. These lesions may arise from accumulation of DNA damage at photoaged tissues. One of the emerging techniques for characterization of biological tissues is the fluorescence lifetime spectra analysis, which has been reported as a technique of great potential for diagnostic purposes. (1-3) The main targeted fluorophores are NADH (nicotinamide adenine dinucleotide) and FAD (flavin adenine dinucleotide), which have free and bound states, each one with different average lifetimes. (1-2) The average lifetimes for free and bound NADH and FAD change according to tissue metabolic alterations and allow a non-invasive clinical investigation of injuries such as skin lesions. (3) To differentiate the normal skin and each skin lesion, it is necessary to take into account the variability of skin phototypes and the possible areas where a lesion may develop. The objective of this study is to evaluate the variation on fluorescence lifetimes of normal skin at sun exposed and sun non-exposed areas, in order to associate changes in the fluorescence decay with the photoaging process due to the ultraviolet exposure of the skin. This is the first *in vivo* evaluation in humans of the portable system assembled to be used at the Amaral Carvalho Hospital. The fluorescence lifetime is determined by excitation of NADH and FAD with two lasers, one emitting at 378 nm and the other at 445 nm. Optical fibers are used for both light delivery to the tissue and collecting the fluorescence at the surface of the skin. An optical filter is used to remove the backscattered laser light. The photodetector is a hybrid photomultiplier tube virtually free of the after-pulsing effect, which may interfere with the fluorescence lifetime measurement. In order to count photons and determine the fluorescence decay curve, the Time Correlated Single Photon Counting (TCSPC) technique is used. For the steady-state fluorescence spectroscopy, the collection fiber can be directly connected to an Ocean Optics USB2000-FLG spectrometer. To compare the fluorescence emission at sun exposed and non-exposed areas of skin, measurements were performed at the dorsal forearm ($n = 13$) and volar arm ($n = 13$) of normal volunteers. Fluorescence lifetime data were collected and processed using the SPCM Software (Becker and Hickl, Berlin, Germany) and analyzed with a MATLAB R2012a (version R2012a, Mathworks, Natick, MA, USA) home-made script. The collected fluorescence decay curve was fitted by a biexponential function. The sun exposed and non-exposed areas showed statistical differences with $p < 0.05$ at student's t-test in most of parameters of the biexponential decays fitted to the experimental curve. Then, the discrimination of these areas using fluorescence lifetime spectroscopy analysis is possible, which allow many applications at aesthetics, dermatology and health studies. The next steps include the investigation of several types of skin lesions and multivariate analysis of the collected data.

Keywords: Fluorescence lifetime spectra. Skin. Photoaging.

Referências:

- 1 SKALA, M. C. et al. In vivo multiphoton microscopy of NADH and FAD redox states, fluorescence lifetimes, and cellular morphology in precancerous epithelia. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 104, n. 49, p. 19494-19499, 2007. doi: 10.1073/pnas.0708425104.
- 2 SKALA, M. C. et al. In vivo multiphoton fluorescence lifetime imaging of protein-bound and free nicotinamide adenine dinucleotide in normal and precancerous epithelia. **Journal of Biomedical Optics**, v. 12, n. 2, p. 024014-1-024014-10, 2007. doi: 10.1117/1.2717503.
- 3 PIRES, L. et al. Time-resolved fluorescence lifetime for cutaneous melanoma detection. **Biomedical optics express**, v. 5, n. 9, p. 3080-3089, 2014. doi: 10.1364/BOE.5.003080.

PG130

High prevalence of linezolid and tigecycline non-susceptibility among CC5 MRSA in a southeastern Brazilian hospital

OKADO, J. B.¹; UEMURA, E. R.¹; BOGNI, S. C.¹; FREGOLENTE, F. A.¹; MATTOS, V.¹; CAMARGO, I. L. B. da C.¹

jessica.okado@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Adopting policies to minimize outbreaks and determining the antimicrobial susceptibility profile of bacterial lineages in order to avoid inadequate antibiotic therapy are important actions in the hospital environment. (1) From July/2011 to January/2012, 49 *S. aureus* isolates were recovered from infection sites of patients from a hospital in São Carlos/SP. Among them, 42 (85%) were identified as MRSA and were genotypically characterized by Pulsed Field Gel Electrophoresis, Staphylococcus Cassette Chromosome *mec* (SCC*mec*) typing, Multilocus Sequence Typing and screening for virulence-associated genes. They also had the Minimal Inhibitory Concentration (MICs) of daptomycin, quinupristin-dalfopristin, teicoplanin, tetracycline, tigecycline and vancomycin determined by the broth microdilution method. (2) The presence of heterogeneous daptomycin-resistant *S. aureus* (hDRSA) and heterogeneous vancomycin-intermediate *S. aureus* (hVISA) was verified by Population Analysis Profile (PAP). MRSA could be clustered into three pulsotypes, being pulsotype A the most prevalent (88.1%). ST5, ST105 and ST8 were found among the 11 representatives of these pulsotypes and SCC*mecII* was the most prevalent (95.2%). Twelve MRSA (28.5%) were resistant to linezolid and six (14.2%) to tigecycline. Among them, three were resistant to both antimicrobials. Two isolates were considered hVISA and three hDRSA by PAP. One MRSA had the worst profile being hVISA, hDRSA and resistant to linezolid and tigecycline. All isolates were susceptible to the other antimicrobials tested. Beta-hemolysis and the virulence profile "sei, sen, seo, sem, lukDE, hIA and hIB" were found in 90% and 49% of the isolates, respectively. In conclusion, most of the isolates from this hospital were characterized as SCC*mecII*-ST5/ST105, a lineage worldwide spread. A disturbing fact is the reported resistance to linezolid, vancomycin, daptomycin and tigecycline on some isolates, usually caused by mutations. The high prevalence of linezolid resistance was not due to a clonal dissemination, according to the genotyping data. However, clinicians should avoid an excessive use of linezolid in this hospital in order to not select and promote the spread of the multidrug resistant clone.

Keywords: MRSA. Linezolid resistance. Tigecycline resistance.

Referências:

1 COIA, J.E. et al. Guidelines for the control and prevention of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) in healthcare facilities. **Journal of Hospital Infection**, v. 63, n. S1, p. S1-S44, 2006. doi: 10.1016/j.jhin.2006.01.001.

2 CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE. **M 100-S25 performance standards**



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

for antimicrobial susceptibility testing: 25th informational supplement . Wayne, Pennsylvania: 2015.

PG131

Hamiltoniano intensity dependent na teoria do laser

OLIVEIRA NETO, F.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹; TEIZEN, V. F.¹

foliveiraneto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Tem-se como intuito desse projeto a construção e o desenvolvimento de um Hamiltoniano *intensity dependent*, cuja interação entre radiação - matéria dependa do número de fótons que residem dentro da cavidade do laser. O Hamiltoniano de Jaynes Cummings é tradicionalmente conhecido por descrever a interação radiação - matéria, e através de uma modificação efetuada no mesmo, pretende-se obter uma nova distribuição do número de fótons dentro de tal cavidade, bem como uma nova estatística em relação ao modelo usual de laser. Para tal, faz-se uso de um modelo de átomo de dois níveis para a descrição da matéria dentro da cavidade, bem como conhecimentos de informação e óptica quântica (1) para o desenvolvimento e análise dos resultados obtidos, juntamente com aplicações de Hamiltonianos não lineares (2), necessários para o entendimento do projeto, além de técnicas de armadilhas de íons para compreensão dos mecanismos de aprisionamento dos íons dentro da cavidade do laser.

Palavras-chave: Hamiltonianos não lineares. Óptica quântica. Informação quântica.

Referências:

1 SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, S. **Quantum optics**. United Kingdom: Cambridge University Press, 1997. 656 p.

2 RODRIGUEZ-LARA, B. M. An intensity-dependent quantum Rabi model: spectrum, SUSY partner and optical simulation. **Journal of the Optical Society of America**, v. 31, p. 7, 2014. doi: 10.1364/JOSAB.31.001719.

PG132

Descoberta e planejamento de novos agentes antibacterianos candidatos a agroquímicos para a escaudadura das folhas

OLIVEIRA, A. A.¹; GUIDO, R. V. C.¹

andrew@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A bactéria gram-negativa *Xanthomonas albilineans* (Ashby) Dowson é causadora de uma das principais fitopatologias encontradas em culturas de cana-de-açúcar: a escaudadura das folhas. A doença ocorre em todas as regiões onde há produção canavieira. Os sintomas variam desde diminuição do caldo extraído até a necessidade da reforma precoce dos canaviais, gerando prejuízos econômicos e sociais significativos. (1) No Brasil, a importância e impacto econômico da escaudadura das folhas têm sido subestimados devido a dificuldades no diagnóstico, uma vez que os sintomas se assemelham a outras fitopatologias (e.g., raquitismo das soqueiras). Atualmente, não é conhecido qualquer produto, químico ou biológico, que controle essa fitopatia. Portanto, esse grave panorama torna urgente o desenvolvimento de novas alternativas para o controle da escaudadura das folhas. O presente projeto de pesquisa visa à identificação e o desenvolvimento de novas moléculas com atividade antibacteriana, através da triagem de compostos de origem natural e sintética, biologia molecular estrutural e do planejamento em química medicinal, empregando uma combinação de métodos e estratégias avançadas, que contemplam os aspectos modernos do estado da arte no planejamento de moléculas bioativas. Nesse sentido, dois alvos moleculares essenciais para o desenvolvimento da *X. albilineans* e severidade dos sintomas da doença foram selecionados: diidropteroato sintase (XaDHPS, E.C. 2.5.1.15) e benzoato coenzima A ligase (XaBCL, E.C. 6.2.1.25), respectivamente. Além disso, ensaios fenotípicos de inibição são empregados para a identificação de compostos ativos frente a cultura de *X. albilineans*. Nesses 24 meses de doutorado direto avanços significativos foram obtidos. Entre eles destacam-se: i. créditos obrigatórios cursados para depósito da tese; ii. clonagem e expressão dos genes codificantes dos alvos moleculares selecionados; iii. desenvolvimento de um protocolo eficiente para o isolamento e purificação da enzima XaDHPS (teor > 95%); iv. triagem e identificação de condições promissoras para a cristalização da XaDHPS; v. coleta de dados, processamento e determinação estrutura 3D da enzima XaFolP em duas formas (apoenzima e complexo com substrato); vi. triagem e identificação de compostos bioativos como inibidores de *X. albilineans*. Os resultados deste trabalho permitirão que métodos de planejamento baseado na estrutura do alvo receptor (SBDD) possam ser aplicados para a identificação e desenvolvimento de novos compostos bioativos como candidatos a agroquímicos para cultura de cana-de-açúcar

Palavras-chave: *Xanthomonas albilineans*. DHPS. BCL.

Referências:

1 MENSİ, I; VERNEREY, M. S., GARGANI, D.; NICOLE, M.; ROTT, P. Breaking dogmas: the plant vascular pathogen *Xanthomonas albilineans* is able to invade non-vascular tissues despite its reduced genome. **Open biology**, v. 4, n. 2, p. 130116-1-130116-12, 2014.

PG133

Refratômetro diferencial para medida simultânea de Brix e sacarose

OLIVEIRA, A. R.¹; DOMENEGUETI, J. F. M.¹; ZÍLIO, S. C.¹

anderson.roberto.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste trabalho apresentamos uma técnica totalmente nova para a medida da rotação da polarização da luz por uma substância que possui atividade óptica. O sistema utiliza somente um LED, dois polarizadores, um prisma de vidro semi cilíndrico, uma cubeta, uma CCD e um termopar para controle da temperatura. Luz proveniente do LED passa pelo primeiro polarizador, cujo eixo se encontra a 45° , e incide no prisma pelo lado semi cilíndrico, ocorrendo reflexão na base do prisma aproximadamente no ângulo crítico. A luz refletida passa então pela cubeta e depois por um analisador, cujo eixo se encontra paralelo ao primeiro polarizador, e então o sinal é captado pela CCD. Quando a cubeta é preenchida com água, observa-se na CCD uma interferência destrutiva exatamente no ângulo crítico (1) caracterizado por um mínimo de intensidade nesse ângulo. (2) Variações de temperatura podem causar oscilações na posição do mínimo devido ao coeficiente termo-óptico do prisma de vidro e de desalinhamentos causados pela expansão térmica dos materiais envolvidos. Se uma substância opticamente ativa é utilizada para preencher a cubeta, a posição desse mínimo é alterada dependendo do grau de rotação da polarização imposto pela substância. Uma calibração é necessária e pode ser feita utilizando-se soluções de concentração conhecida de sacarose ou frutose, por exemplo, e considerando-se a temperatura do sistema. O aparato obtido foi utilizado para medir concentração de soluções de sacarose e frutose e apresenta uma resolução de 0,001 g/ml ou aproximadamente 0,1% (m/m). Este dispositivo pode ser utilizado na indústria sucroalcooleira para a medida da quantidade de açúcar em cana e também na indústria farmacêutica para a identificação de substâncias opticamente ativas destróginas ou levóginas e estudo das misturas racêmicas.

Palavras-chave: Dispositivos ópticos. Polarimetria. Ângulo crítico.

Referências:

- 1 ZÍLIO, S. C. A simple method to measure critical angles for high-sensitivity differential refractometry. **Optics Express**, v. 20, n. 2, p. 1862-1867, 2012.
- 2 KUKHARCHIK, P. D.; SERDYUK, V. M.; TITOVITSKII, I. A. Total internal reflection of a Gaussian light beam. **Technical Physics**, v. 44, n. 4, p. 417-421, 1999.

PG134

Development and testing of the prototype of multifunctional autoclave

OLIVEIRA, B. P. de¹; BLANCO, K. C.¹; BAGNATO, V. S.¹

b.p.oliveira@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Contamination by micro-organism is a serious problem in all industries and fields primarily in areas related to the use of equipment that are used in medical, pharmaceutical and dental procedures. For the control of microbial agents are used physical or chemical techniques for decontamination and sterilization.(1-2)After use of surgical instruments, if the proper security protocols are not carried out, it may cause contamination between patients, health professionals and even a cross-contamination (between instruments). These contamination inhibition protocols required by all safety regularmentadores organs health. The usual decontamination methods are performed by moist heat (autoclave common) and immersion in chemicals. But the traditional decontamination methods have limitations as the type of material being autoclaved in the case of moist heat, and the uncertainty of the effectiveness of chemical agents. Therefore, it is of essential importance the development of a device that adds a synergistic fashion secure and rapid techniques in a single decontamination equipment. One option for this problem was the development of a multifunctional autoclave 21 L using thermal coagulation agents, ozone and UV acting separately or combined to meet the need of the medical and dental field. To validate the tests used was the most resistant microorganism ozone and UV techniques, the bacteria *E. coli*.(3) For assessment of effects of sterilization contaminated surface to the initial concentration of materials to be 108 CFU / ml and after being subjected to the autoclaving process the death kinetics was performed from quantitative method of cell count after each experiment. The initial results of the decontamination equipment surfaces showed a variation of at least 99.9% (3 log CFU / mL) to a maximum 99.99999 (Log 8 CFU / ml) in a run time of 30 minutes application

Keywords: Autoclave. UV. Ozone.

Referências:

- 1 GAYAN, E.; CONDON, S.; ALVAREZ, I.. Biological aspects in food preservation by ultraviolet light: a review. **Food and Bioprocess Technology**, v. 7, n. 1-20, p. 7, 2014. doi: 10.1007/s11947-013-1168-7.
- 2 KHADRE, M.A.; YOUSEF, A.E.; KIM, J.G. Microbiological aspects of ozone applications in food: a review. **Journal of Food Science**, v. 66, n. 9, p. 1242-1252, 2001.
- 3 BIALKA, K.I.; DEMIRCI, A.. Decontamination os *Escherichia Coli* 0157:H7 and *Salmonella enterica* on blueberries using ozone and pulsed UV-light. **Journal of Food Science**, v. 72, n. 9, p. M391-396, 2007. doi: 10.1111/j.1750-3841.2007.00517.x.

PG135

Fluid dynamics in reservoir rocks: a computational physics approach to understand NMR data

OLIVEIRA, E. L.¹; TREVISAN, W. A.²; SANTOS, B. C.²; SURMAS, R.²; MACHADO, V. F.²; BONAGAMBA, T. J.¹

everton.lucas.oliveira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²CENPES/PETROBRAS

Fluid dynamics in porous materials is a very important issue in many scientific and technological areas, especially in oil exploration. Nowadays, the oil industry employs several experimental methods to perform well-logging. It is known that Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is one of the most important methods for Carbonate Reservoirs Exploration, which becomes an increasing percentage of the world's reserves. Since the early 50s, many companies invest intensely in NMR research to study fluid behavior in rock reservoirs. This is still an important topic for the oil industry and several NMR studies are being developed in order to understand fluid dynamics in porous media and estimate properties such as permeability, tortuosity, surface relaxivity and pore size distribution. (1) To explore the correlations between NMR data and the fluid dynamics restricted in porous media, we developed computational techniques connecting both physical phenomena, using a random walk method in position and phase space. For a good approximation between the numerical and experimental results, the simulation preserves the complexity of translational diffusion through the microstructures on the digital rocks using 3D micro-CT images to construct the digital reservoir pore space. (2-3) This computational physics model is able to simulate information obtained by one and two-dimensional NMR techniques, such as T1 and T2 distributions, T1xT2, DxT2 and T2xT2 Exchange, making it possible to identify different diffusion regimes and better understand the spin migration along different sites in the porous space.[3] Recently, in order to better understand this petrophysical problem, we have established a fruitful partnership with CENPES/Petrobras. In particular, the PhD project of the first author is being supported by a program denominated Industrial Academic PhD (in Portuguese: Doutorado Acadêmico Industrial - DAI) with a scholarship from the National Council for Scientific and Technological Development (in Portuguese: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq).

Keywords: Nuclear magnetic resonance. Monte Carlo. Eigenmodes of diffusion.

Referências:

1 SONG, Y.-Q. Magnetic resonance of porous media (MRPM): a perspective. **Journal Magnetic Resonance**, v. 229, n. 1, p. 12-24, 2013. doi: 10.1016/j.jmr.2012.11.010.

2 D'EURYDICE, M. N. . **Development of methodologies for the study of porous media by nuclear magnetic resonance**. 2011. 172p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos,



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

3 OLIVEIRA, E. L.. **Nuclear spin diffusion in porous media - a computational approach of NMR.** 2015. 143p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

PG136

Desenvolvimento de ferramenta computacional para obtenção automatizada de dados em testes comportamentais do tipo Campo Aberto

OLIVEIRA, I. M. de¹; PAIVA, F. F.¹

bodelha@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Testes comportamentais em animais são amplamente utilizados quando se deseja observar comparativamente alguma característica. São exemplos analisar o comportamento sob efeito de alguma substância e sem administração da mesma (1), identificar perfis comportamentais de linhagens diferentes dentro de uma mesma espécie (2), ou ainda de uma mesma linhagem, em condições ambientais e fisiológicas diferentes. (3) Pela simplicidade de construção e tomada de dados, o Teste de Campo Aberto (Open Field Test) se destaca frente aos demais, e por isso foi o escolhido para esta fase do projeto. Ele consiste em soltar o animal numa caixa dividida em quadrantes e observar, dentre outros dados, a distância percorrida, velocidade média, número de elevações, número e duração de 'paradas', frequência nos quadrantes centrais e número de coprólitos ao fim do teste. Podem-se entender estes como elementos quantitativos, anotados e comparados enquanto valores numéricos, que embasarão um resultado final qualitativo. Normalmente os testes tem duração de 5 a 15 minutos, e são gravados em vídeo, para posteriormente serem assistidos, um a um, pelo pesquisador que fará anotações dos elementos citados. Esse processo de análise é bastante pouco eficiente e altamente passível de falhas, sobretudo as relacionadas ao observador, como imperícia e estado emocional. Perante o exposto, apresenta-se o objetivo central do projeto: desenvolver uma ferramenta computacional que faça, a partir dos vídeos obtidos em testes de Campo Aberto, uma extração automatizada dos dados quantitativos que subsidiarão a análise do comportamento, esperando-se com isso, tornar as análises de Testes de Campo Aberto mais robustas e reproduzíveis. Far-se-á validação da ferramenta através de comparação entre os resultados obtidos aplicando-se a mesma a uma série de vídeos com aqueles conseguidos da maneira usual por avaliadores experientes nesta mesma série. Têm-se utilizado Python para desenvolvimento da ferramenta, visando facilitar tanto o acesso por parte dos grupos interessados quanto compartilhamento da plataforma. A essência da lógica de programação utilizada é comparar um frame com o seu subsequente, e, a partir de cada um dos frames e do output da comparação, determinar a localização do animal na caixa, bem como atribuir um comportamento para aquele instante. Foi recorrente nas simulações o uso de funções de segmentação de imagens, que consistem em definir, a partir da imagem original, um número reduzido de regiões segundo critério específico de semelhança entre pixels. Isso reduz o número de dados a ser manipulados, aprimorando desempenho e resultado. Atualmente tem-se investigado qual a melhor técnica de segmentar os frames de acordo com os interesses de cada micro etapa, considerando-se uma gama de variações possíveis nas condições de realização do teste e gravação dos vídeos, sobretudo, com relação à iluminação e contraste de cores, sem perder de vista resolução e quantidade de frames por segundo. Os resultados preliminares são promissores e indicam que é bastante possível atingir os objetivos do projeto, sendo a próxima etapa buscar e otimizar maneiras de se classificar os comportamentos, permitindo a extração de todos os parâmetros quantitativos importantes para análise dos dados do teste de Campo

Aberto.

Palavras-chave: Open field test. Tomada automatizada de dados. Processamento computacional de vídeos.

Referências:

1 CHOLERIS, E. et al. A detailed ethological analysis of the mouse open field test: effects of diazepam, chlordiazepoxide and an extremely low frequency pulsed magnetic field. **Neuroscience & Biobehavioral Reviews**, v. 25, n. 3, p. 235-260, 2001. doi: 10.1016/S0149-7634(01)00011-2.

2 CAROLA, V. et al. Evaluation of the elevated plus-maze and open-field tests for the assessment of anxiety-related behaviour in inbred mice. **Behavioural Brain Research**, v. 134, n. 1-2, p. 49-57, 2002. doi: 10.1016/S0166-4328(01)00452-1.

3 VALENTINUZZI, V. S. et al. Locomotor response to an open field during C57BL/6J active and inactive phases: differences dependent on conditions of illumination. **Physiology & Behavior**, v. 69, n. 3, p. 269-275, 2000. doi: 10.1016/S0031-9384(00)00219-5.

PG137

Avaliação da terapia fotodinâmica em células de melanoma murino

ONO, B. A.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹

bruno.ono@usp.br

¹INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP

A terapia fotodinâmica é um tratamento relativamente novo e não invasivo (1), ao contrário da cirurgia. A terapia consiste na combinação de um fotosensibilizador, um medicamento, e uma fonte de luz com um comprimento de onda específico. Este fotosensibilizador é somente ativado pela luz, levando à geração de espécies reativas de oxigênio, como o oxigênio singlete. Ele ao interagir com os componentes celulares pode causar sérios danos e levar a morte celular. Por ser um tratamento alternativo aos existentes hoje em dia, os estudos nesta área vem aumentando a cada ano. No Brasil de acordo com o INCA (Instituto Nacional do Cancer), eles esperaram aproximadamente 6.000 novos casos de melanoma em 2014. Apesar de possuir baixa incidência, é um dos tipos de cancer mais agressivos, pois há uma alta taxa de metástase levando os pacientes ao óbito. Um dos grandes desafios para terapia fotodinâmica é o tratamento do cancer melanoma (2), pois a alta produção de melanina pelos melanócitos impede a penetração da luz e, portanto, a ativação do fotosensibilizador. Neste estudo foi investigado a morte celular de melanoma murino (B16F10) em monocamada através da avaliação de viabilidade celular (MTT) usando diferentes fluências de luz. Além disso, foi observado a captação do fotossensibilizador, Photodithazine (PDZ), pelas células melanóticas em diferentes tempos e através da microscopia confocal de fluorescência nós observamos a co-localização (3) deste fotossensibilizador com as mitocôndrias celulares. Assim buscamos um melhor entendimento do mecanismo de atuação deste fotosensibilizador e a sua ação contra o cancer melanoma.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Melanoma. Modelo de monocamada celular.

Referências:

- 1 FAYTER, D.. A systematic review of photodynamic therapy in the treatment of pre-cancerous skin conditions, Barrett's oesophagus and cancers of the biliary tract, brain, head and neck, lung, oesophagus and skin. **Health Technology Assessment**, v. 14, n. 37, p. 1-288, 2010. doi: 10.3310/hta14370.
- 2 BALDEA, I.. Photodynamic therapy in melanoma - an update. **Journal of Physiology and Pharmacology**, v. 63, n. 2, p. 109-18, 2012.
- 3 BOLTE, S.; CORDELIÈRES, F. P.. A guided tour into subcellular colocalization analysis in light microscopy. **Journal of Microscopy**, v. 224, n. Pt.3, p. 213-32, 2006.

PG138

Desenvolvimento de uma plataforma multimodal para o estudo da hemodinâmica cerebral: uma abordagem combinando ASL e NIRS

PASCHOAL, A. M.¹; PAIVA, F. F.¹; MESQUITA, R.²

ampaschoal@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Física "Gleb Wataghin- UNICAMP

Nos últimos anos, um ramo das pesquisas relacionadas à medicina tem gerado um crescente interesse, tanto por parte dos pesquisadores quanto pelas agências governamentais e particulares que fomentam estas pesquisas. Trata-se da neurociência, que visa entender cada vez mais o funcionamento do cérebro. Dentro da neurociência, encontra-se o ramo da neuroimagem, no qual medidas de perfusão sanguínea cerebral (CBF) (1) tem cada vez ganhado mais importância, uma vez que a partir da mesma se pode monitorar a fisiologia cerebral dos pacientes, permitindo, dessa forma, um diagnóstico mais rápido e preciso de doenças relacionadas ao fluxo sanguíneo, tais como o acidente vascular cerebral (AVC) e a estenose de carótida. Além disso, a partir destas medidas é possível também realizar estudos sobre o envelhecimento por meio dos níveis de perfusão obtido nas medidas, já que este sofre uma variação de acordo com a idade. Em vista disso, métodos para realizar este tipo de medida são cada vez mais importantes e necessários. Atualmente, alguns métodos já estão bem estabelecidos para tais medidas. Entretanto, a maior parte desses métodos são considerados invasivos aos pacientes, seja pela injeção de agentes de contraste intravenoso ou pela exposição do paciente à radiação ionizante. Por todos estes motivos, este trabalho envolve o estudo e a aplicação de técnicas não invasivas para avaliação da hemodinâmica cerebral basal e em resposta à determinados estímulos, sejam eles visuais, motores ou de qualquer outra natureza. Isso será feito através da criação de uma robusta plataforma completamente não invasiva para medidas da hemodinâmica cerebral. Esta plataforma consistirá na junção do método de Arterial Spin Labeling (ASL) (2), que é baseada em princípios da Ressonância Magnética (RM), com uma técnica óptica chamada Near Infrared Spectroscopy (NIRS) (3). Esses dois métodos serão explorados de modo a estabelecer entre eles uma relação de complementaridade com o objetivo de obter o maior número de informações possível a respeito da hemodinâmica cerebral. Essa complementaridade entre os métodos é bastante interessante pois apesar de ambos visarem medir a perfusão cerebral, elas se baseiam em diferentes parâmetros para chegar a tal medida, de modo que seja possível obter um quadro de respostas bastante completo. Ao final deste trabalho, espera-se que esta plataforma possa ser aplicada em doenças cerebrais vasculares, como as já citadas acima, e em outras, como, por exemplo, a Doença de Alzheimer.

Palavras-chave: Arterial spin labeling. NIRS. Perfusão sanguínea cerebral.

Referências:

1 LE BIHAN, D. Theoretical principles of perfusion imaging: application to magnetic resonance imaging. **Investigative Radiology**, v. 27, n. suppl. 2, p. S6-S11, 1992.

2 DETRE, J. A. et al. Tissue specific perfusion imaging using arterial spin labeling. **NMR in Biomedicine**, v. 7, n. 1-2, p. 75-82, 1994.

3 MESQUITA, R. **Desenvolvimento de métodos ópticos para o estudo do acoplamento neurovascular metabólico intrínseco a dinâmica cerebral**. 2009. 140p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp, Campinas, 2009.

PG139

Moléculas de Rb₂ em uma armadilha óptica

PASSAGEM, H. F.¹; SILVA, P. C. V. da¹

henry.passagem@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Atualmente, a armadilha atômica mais simples é a armadilha magneto-óptica, a qual envolve um gradiente de campo magnético estático e um campo eletromagnético ressonante. Esta combinação permite criar um ambiente que resfria e aprisiona átomos cujas velocidades iniciais sejam da ordem de 1K. Com isso, é possível obter amostras atômicas com temperaturas da ordem de centenas de μK , densidades entre 10^{10} e 10^{12} átomos/cm³ e um total de átomos aprisionados entre 10^6 e 10^9 . Este tipo de armadilha foi fundamental, nos últimos 25 anos, para o desenvolvimento da área de Física Atômica, permitindo o estudo de colisões atômicas em um regime de temperatura até então inédito; metrologia de tempo e frequência com alta precisão; obtenção de moléculas no potencial eletrônico fundamental (1); e a obtenção da condensação de Bose-Einstein. Apesar de sua versatilidade e simplicidade, este tipo de armadilha apresenta algumas sérias limitações, entre elas o fato de só poder ser utilizada em sistemas atômicos com transições eletrônicas fechadas permitidas. Isso limita seriamente as espécies atômicas onde podemos utilizá-la. Além disso, esta armadilha não é conservativa e apresenta um curto tempo de vida devido à colisões envolvendo estados excitados. Graças ao desenvolvimento de lasers de alta potência, as armadilhas baseadas na força de dipolo induzido ganharam destaque. Permitindo assim, tanto o aprisionamento de moléculas no estado fundamental(2) quanto à obtenção de condensados bosônicos atômicos. Contudo, devido ao fato do potencial da armadilha ser muito raso (< 5 mK) é necessário um pré-resfriamento da amostra. A forma usual de carregá-la é através do uso de uma armadilha magneto-óptica como passo inicial. Nos últimos anos, nosso laboratório dominou a técnica de armadilha de dipolo utilizandolaser de fibra (em $1.07 \mu\text{m}$) . Atualmente, dispomos de uma armadilha cruzada utilizando o laser de fibra, onde aprisionamos átomos de Rb. Nesta armadilha, o objetivo é produzir moléculas frias, tanto homonucleares quanto heteronucleares. Estas são de grande interesse na comunidade internacional. Várias propostas teóricas sugerem o uso de tais moléculas para simulação de sistemas de spin em matéria condensada, transições de fase quânticas e informação quântica. O objetivo deste projeto é utilizar nossa armadilha óptica de dipolo para aprisionar átomos de Rb, fotoassociá-los formando uma molécula aprisionada (Rb₂). Em seguida, processos de bombeamento óptico serão utilizados para produzir moléculas no estado vibracional fundamental do potencial eletrônico fundamental. Tal amostra poderá ser utilizada para estudar colisões moleculares

Palavras-chave: Moléculas. Armadilha óptica. Física atômica.

Referências:

1 VITEAU, M. et al. Optical pumping and vibrational cooling of molecules. **Science**, v. 321, n. 5886, p. 232-234, 2008. doi: 10.1126/science.1159496.

2 MENEGATTI, C. R. et al. Trap loss in a rubidium crossed dipole trap by short range photoassociation. **Physical Review A**, v. 87, n. 5, p. 053404-1,053404-6, 2013. doi: 10.1103/PhysRevA.87.053404.

PG140

Shake-up effect in photoluminescence of integer quantum hall system formed in InGaAs/InP quantum wells

PATRICIO, M. A. T.¹; PUSEP, Yu. A.¹; LAPIERRE, R. R.²

marcoatp@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centre for Emerging Device Technologies - Department of Engineering Physics - McMaster University

Polarization-resolved magneto-photoluminescence is studied in **InGaAs/InP** single quantum wells. Depending on the magnetic field, a number of Landau levels is observed in photoluminescence spectra. In the range of the filling factor $\nu \geq 4$ the number of populated Landau levels contributing to the photoluminescence is found to be equal to the corresponding filling factor, while at $\nu \leq 3$ the number of observed Landau levels is larger than the filling factor (1), which implies an occupancy of the Landau levels above the Fermi level. Such partial occupancy of the Landau levels with energies higher than the Fermi energy is due to shake-up processes caused by electron-electron interaction (2). At the filling factor around $\nu = 2$ the shake-up process was found to manifest itself in the downshifted cusp of the energy of the σ^- polarized emission from the excited **LLs**, while no change was observed in the energy of the σ^+ polarized emission. The different energies of differently spin-polarized excited Landau levels cause the magnetic field induced polarization of the emission from excited Landau levels.

Keywords: Quantum well. Quantum Hall effect. Photoluminescence.

Referências:

- 1 PUSEP, Yu. A. et al. Circularly polarized photoluminescence as a probe of density of states in GaAs/AlGaAs quantum hall bilayers. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 4, p. 046802-1-046802-5, 2012.
- 2 GLASBERG, S.; SHTRIKMAN, H.; BAR-JOSEPH, I. Photoluminescence of a low-density two-dimensional hole gas in a GaAs quantum well: observation of valence-band Landau levels. **Physical Review B**, v. 63, n. 20, p. 201308-1-201308-4, 2001.

PG141

Estudos estruturais e funcionais de novos complexos do receptor PPAR γ

PAULA, K.¹; NASCIMENTO, A. S.¹

karinadepaulausp@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Os receptores nucleares (RNs), constituem uma superfamília de proteínas intracelulares capazes de reconhecer sequências específicas no DNA, sensíveis a ligantes e estão envolvidos em vários processos metabólicos do organismo. (1) Eles agem através da regulação da transcrição de genes-alvo respondendo a sinais metabólicos, hormônios e outras moléculas regulatórias integrando muitas vias de sinalização. (2) Os receptores ativadores da proliferação de peroxissomos (PPARs) são RNs com papel importante no metabolismo de glicose, na adipogênese, migração de macrófagos, dentre outros fatores. Estes efeitos são mediados pela ação de moléculas endógenas e por duas classes de fármacos: as tiazolidinadionas (TZDs), e os fibratos. O PPAR γ é o alvo molecular dos TZDs, empregados no tratamento do diabetes do tipo II. (3) Com os achados recentes relatando efeitos colaterais severos associados ao uso dos fármacos desta classe e à importância do PPAR γ no metabolismo de glicose e na sensibilização da insulina, o presente projeto justifica-se como um esforço para avançar na compreensão da interação entre ligantes sintéticos com o receptor PPAR γ (bases estruturais) e a proposição de moléculas mais seguras e mais eficazes para a manutenção de níveis euglicêmicos. Para os ensaios de cristalização complexado com o ligante 3 (ASN007) resultou em uma estrutura cristalográfica que apresentou um comportamento de agonista parcial para o PPAR γ com um modo de ligação diferente de agonistas totais como a rosiglitazona. Este ligante apresentou interações hidrofóbicas que estabilizam as fitas-Betas, além de não interagir diretamente com a H12. Os protocolos de fluorescência em diferentes experimentos independentes conseguimos determinar o K_d do ANS pelo PPAR γ com valores reprodutíveis muito próximos ao que estão na literatura. Este conjunto de informações estruturais apresentados neste trabalho para o PPAR γ foi de grande valia para o entendimento das interações que esse receptor é capaz de fazer na presença de um ligante, além de que alguns destes complexos apresentados neste trabalho possuem características únicas que poderão ser útil no desenvolvimento de novos moduladores seletivos do PPAR γ semelhante ao que já se encontram no mercado porém com efeitos colaterais reduzidos.

Palavras-chave: Receptores nucleares. Receptor ativador da proliferação de peroxissomos. Agonistas parciais.

Referências:

- 1 WANG, L. et.al. Natural product agonists of peroxisome proliferator-activated receptor gamma (PPAR γ): a review. **Biochemical Pharmacology**, v. 92, n. 1, p. 73-89, 2014.
- 2 HARMON, G. S.; LAM, M.T.; GLASS, C.K. PPARs and lipid ligands in inflammation and metabolism. **Chemical Reviews**, v. 111, n. 10, p. 6321-6340, 2011.

3 NASCIMENTO, A.S. et.al. Structural rearrangements in the thyroid hormone receptor hinge domain and their putative role in the receptor function. **Journal of Molecular Biology**, v. 360, n. 3, p. 586-598, 2006.

PG142

Production of a Bose-Einstein condensate of sodium atoms and study of correlated photons produced by pairs of condensed atoms after cooperative excitation

PEDROZO-PENAFIEL, E.¹; CASTILHO, P. C. M.¹; MERCADO-GUTIERREZ, E. D.¹; FARIAS, K. M.¹; BAGNATO, V. S.¹

edwin@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Cold and ultracold atoms has become a fundamental topic in atomic and molecular physics in the last decades and are used as test bench to study many phenomena in fundamental physics, for instance, atomic interactions, light-matter interaction, and quantum simulations among many others phenomena. (1) Also, these ensembles are used to manipulate photon states, which is a fundamental issue in quantum optics and quantum information. (2) In this work we have two principal goals: first, the construction of a BEC of sodium atoms and second, the production of correlated photons by a pair of condensed atoms. To achieve the first goal, we constructed a two-dimensional magneto-optical trap (2D MOT) in order to produce a high flux of cold sodium atoms which load a 3D MOT. Additionally, we performed a comparison with another apparatus that produce high flux of atoms, known as Zeeman-slower. The 2D MOT has great advantages with respect to the Zeeman-slower: first, it is much more compact, and second, it produces a smaller background pressure in the science chamber due to the cold and well collimated atomic beam reaching the science chamber where the 3D MOT and subsequently the BEC are produced. After the construction, assembly and characterization of this cold atom source to load the 3D MOT, we have started the subsequent steps to achieve the BEC. The experimental requirements like ultra-high vacuum chambers, lasers, optical system, and electronics are already implemented. The control system for the whole sequence of processes to obtain the BEC is under optimization. With all these parts, we are in the final stages to produce the BEC of sodium atoms. To accomplish the second goal, the system to study the correlated photon emission is being developing simultaneously. This system is composed by the optical setup and two single-photon detectors to collect and detect, respectively, the correlated photons emitted by the sample. The work is aimed to measure correlated photons emitted by two condensed sodium atoms, which had being previously excited by a cooperative absorption of two photons. These absorbed photons, which produce the excitation, are far from resonance of any the two involved atomic transition, $3^2S_{1/2} \rightarrow 3^2P_{1/2}$ and $3^2S_{1/2} \rightarrow 3^2P_{3/2}$. Due to this, the cooperative absorption is only possible if there exists interaction between the pair of atoms. When absorption occurs, a pair of sodium atoms are promoted to the total excited state of the system ($3^2P_{1/2} + 3^2P_{3/2}$), which means that one sodium atom is in the first excited state ($3^2P_{1/2}$) and the other one in the second excited state ($3^2P_{3/2}$). Cooperative absorption was demonstrated by our group several years ago (3) and a more detailed description of the phenomenon and experimental system are in given this reference. Summarizing, the whole experimental machine will be able to produce and detect correlated photons of different frequencies, produced by a pair of condensed sodium atoms. This can be a fascinating form of producing correlated photons and can find interesting applications in the future.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Correlated photons. Sodium atoms.

Referências:

- 1 BLOCH, I; DALIBARD, J; NASCIMBENE, S. Quantum simulations with ultracold quantum gases. **Nature Physics**, v. 8, p. 267-276, 2012. doi: 10.1038/nphys2259.
- 2 LUKIN, M. D. Trapping and manipulating photon states in atomic ensembles. **Review of Modern Physics**, v. 75, n. 2, p. 457-472, 2003. doi: 10.1103/RevModPhys.75.457 .
- 3 PEDROZO-PENAFIEL, E. et al. Two-photon cooperative absorption in colliding cold Na atoms. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 25, p. 253004-1-253004-4, 2012.

PG143

Análises de microscopia eletrônica de varredura de amostras de aveia submetidas à hidrólise pela endoglucanase I de *Trichoderma harzianum* (ThCel7B)

PELLEGRINI, V. O. A.¹; REZENDE, C. A.²; POLIKARPOV, I.¹

varnoldi@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química - UNICAMP

A produção de etanol de segunda geração, a partir da hidrólise enzimática da biomassa vegetal é considerada uma alternativa viável e promissora para enfrentarmos a crise energética mundial e diminuirmos a dependência das fontes fósseis de energia. (1) Neste contexto, o presente estudo visou à caracterização molecular, estrutural e funcional de uma enzima constituinte do complexo celulolítico do fungo *Trichoderma harzianum*. Estas enzimas são conhecidas como celulasas e são capazes de degradar moléculas constituintes da parede celular como a celulose e a hemicelulose a açúcares fermentescíveis. A endoglucanase I (*ThCel7B*) foi caracterizada por diferentes técnicas, dentre elas análises de microscopia eletrônica de varredura (MEV) de flocos de aveia (rico em beta-glucano). Após 12 horas de hidrólise à 50 °C, observamos através de imagens coletadas, mudanças na superfície da aveia evidenciando os efeitos de degradação deste substrato em relação às amostras controle e a atividade elevada da endoglucanase contra esse substrato. (2) Nosso resultado é de extrema importância, uma vez que há poucos estudos relativos à visualização da atividade de celulase através de diferentes técnicas de microscopia disponíveis. (3) Deste modo, pretendemos colaborar com ampliação do conhecimento na área da hidrólise enzimática, na tentativa de melhor compreender seus mecanismos.

Palavras-chave: Biocombustível. Celulasas. Microscopia eletrônica de varredura.

Referências:

- 1 NAM, Y.W.; NIHIRA, T.; ARAKAWA, T.; SAITO, Y.; KITAOKA, M.; NAKAI, H.; FUSHINOBU, S. Crystal structure and substrate recognition of cellobionic acid phosphorylase playing a key role in oxidative cellulose degradation by microbes. **Journal of Biological Chemistry**, v. 290, n. 30, p. 18281-18292, 2015.
- 2 PELLEGRINI, V. O.; SERPA, V. I.; GODOY, A. S.; CAMILO, C. M.; BERNARDES, A.; REZENDE, C. A.; PEREIRA JUNIOR, N.; CAIRO, J. P. F.; SQUINA, F. M.; POLIKARPOV, I. Recombinant *Trichoderma harzianum* endoglucanase I (Cel7B) is a highly acidic and promiscuous carbohydrate-active enzyme. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 99, p. 6772-1-6772-14, 2015. doi: 10.1007/s00253-015-6772-1.
- 3 DING, S. J.; GE, W.; BUSWELL, J. A. Endoglucanase I from the edible straw mushroom, *Volvariella*



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

volvacea. Purification, characterization, cloning and expression. **European Journal of Biochemistry**, v. 268, n. 22, p. 5687-5695, 2011.

PG144**Generalized geometric quantum speed limits**PIRES, D. P.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹

diegopaiva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The last decades witnessed intense theoretical and experimental research activity in order to understand the concept of time in quantum mechanics. This subject triggered significant progress in the search for faster and efficient schemes in the implementation of quantum information and communication technologies. Starting from the puzzle "How fast can a quantum state evolve under a given dynamics?", such advances have led to the establishment of quantum speed limits (QSLs), i.e., a lower bound setting the minimum time evolution between two distinct quantum states. (1) Past results have included different, apparently unrelated approaches to quantum speed limits, and sometimes tailored to specific settings, which therefore left a fundamental gap in obtaining a satisfactory answer to the general question posed above. (2) In this work we provide a breakthrough for the study and applications of quantum speed limits. (3) We approach the problem from a general information theoretic point of view and we adopt an elegant geometric formalism to construct an infinite family of quantum speed limits valid for closed and open system evolutions. Our description is based on the geometrization of the quantum state space by introducing an information metric which defines a non-unique measure of distinguishability on the state space. We show in particular how our approach incorporates and unifies the previous specialized results, interpreting them under a new comprehensive framework, and allowing us to reach significantly beyond. From the physical point of view, our investigation is the first to highlight the role of classical populations versus quantum coherences in the determination and saturation of the speed limits. Our results can find applications in the optimization of quantum protocols in quantum computation and metrology, and might provide new insights in fundamental investigations of quantum thermodynamics.

Keywords: Quantum speed limit. Information geometry. Quantum information.**Referências:**

- 1 MANDELSTAM, L.; TAMM, I.. The uncertainty relation between energy and time in non-relativistic quantum mechanics. **Journal of Physics URSS**, v. 9, p. 249, 1945. doi: 10.1007/978-3-642-74626-0_8.
- 2 TADDEI, M. M.; ESCHER, B. M.; DAVIDOVICH, L.; MATOS FILHO, R. L.de. Quantum speed limit for physical processes. **Physical Review Letters**, v. 110, p. 050402, 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.110.050402.
- 3 PIRES, D. P.; CIANCIARUSO, M.; CÉLERI, L.; ADESSO, G.; SOARES-PINTO, D. O.. **Generalized geometric quantum speed limits**. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1507.05848>>. Acesso em: 04 ago. 2015.

PG145

Simulação de nanopartículas superparamagnéticas em campo magnético uniforme e não uniforme

PIZETTA, D. C¹; VIDOTO, E.L.G¹; MARTINS, M. J.¹; TANNUS, A.¹

daniel.pizetta@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nanopartículas de óxido de ferro, superparamagnéticas, tem sido vastamente utilizadas em conjunto com técnicas de ressonância magnética devido a sua característica paramagnética, tamanho, mobilidade, entre outras. Materiais paramagnéticos também são utilizadas para se fazer correções em campos magnéticos, ou seja, linearizá-los, e tal processo é conhecido como *shimming* passivo de campo magnético. O principal interesse será o uso das nanopartículas como forma de modificar o campo magnético em suas proximidades, gerando assim uma espécie de *shimming*. No entanto, apesar de trabalhos recentes sobre a simulação do comportamento de tais nanopartículas em campos magnéticos (1), as modificações causadas por elas no campo ao seu redor são pouco estudadas. Para as simulações, no cálculo das forças magnéticas, serão consideradas as equações para o dipolo induzido na nanopartícula e a interação entre eles. Nas equações de movimento será apenas considerada a força viscosa que o meio produz sobre o movimento de translação. Torques, colisões e a força de repulsão eletrostática são desconsideradas. (2) *Phantoms* serão utilizados para comprovação dos resultados gerados pelas simulações. Espera-se que com o campo gerado pelas nanopartículas, o campo magnético a suas imediações possa ser linearizado de forma mais fácil trazendo assim, uma nova proposta de uso de nanopartículas paramagnéticas e de geração de *shimming* de campo magnético.

Palavras-chave: Simulação numérica. Campo magnético. Shimming.

Referências:

- 1 ICHIJO, N.; TAKEDA, K.; TAKEGOSHI, K.. Paramagnetic shimming for wide-range variable-field NMR. **Journal of Magnetic Resonance** , v. 246, p. 56-61, 2014. doi: 10.1016/j.jmr.2014.06.022.
- 2 KU, J. et al. Numerical simulation of agglomeration process dynamics of ferromagnetic mineral particles in a weak magnetic field. **International Journal of Mineral Processing**, v. 133, p. 46-51, 2014. doi: 10.1016/j.minpro.2014.09.017.

PG146

Implementação de técnicas por imagens de ressonância magnética no estudo de meios porosos

POLLI, R. S.¹; OLIVEIRA, E. L.¹; ANDREETA, M. B.¹; BONAGAMBA, T. J.¹

roberson@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A larga aplicação de técnicas de Imagens por Ressonância Magnética (IRM), principalmente em medicina, com a obtenção de imagens com resoluções cada vez maiores, despertou o interesse da petrofísica. Contudo, o alto contraste de susceptibilidade magnética entre a matriz e o fluido, aliado à presença de impurezas paramagnéticas, a princípio impediram a obtenção de imagens de alta resolução e a relação direta do sinal medido com a quantidade de fluido. No entanto, o surgimento de técnicas específicas, avanços no design experimental (principalmente na instrumentação), melhor compreensão das aplicações dos métodos e o interesse em diferentes propriedades dos fluidos e das rochas levaram à renovação do uso de IRM em petrofísica, com aplicações como: mapeamento de fluxo e estrutura; mapeamento de saturação e porosidade e medidas de curvas de pressão capilar. (1) Volumes significativos de hidrocarbonetos têm sido produzidos a partir de formações de carbonato, que são quase a metade das reservas mundiais. Devido ao fato destas formações serem altamente solúveis em ácido, a estimulação ácida da matriz fornece um meio de baixo custo para melhorar a produtividade. A ação do ácido forma um caminho denominado wormhole. A concentração bem como o fluxo e o tipo de ácido utilizado são importantes para a obtenção de wormholes ótimos, formado por canais que permitam alto fluxo na região próxima ao poço. Experimentos de acidificação da matriz combinadas com as técnicas de visualização são comumente utilizados para estudar os detalhes das redes wormhole formadas durante a acidificação da matriz de carbonato de rochas reservatório. Neste contexto se insere o presente trabalho, com dois objetivos principais. O primeiro é o desenvolvimento de um sistema de imagens uni e tridimensionais e implementação de técnicas de IRM específicas para o estudo de meios porosos. O segundo, fazendo uso do sistema de imagens do grupo CIERMag (Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética), realização de um estudo de visualização em rochas após tratamento ácido da matriz, processo conhecido como acidificação. Após a obtenção das imagens, a morfologia dos wormholes foi estudada com o uso de multifractais com o intuito de se aprimorar a quantificação de variações causadas por litologia e fluidos de estimulação diferentes. O estudo foi realizado com amostras carbonáticas cedidas em uma parceria com a Petrobras, englobando rochas carbonáticas Indiana (padrão), de afloramentos (com litologias semelhantes a de reservatórios de petróleo) e carbonatos profundos (região pré-sal). O próximo passo é o estudo de dinâmica, principalmente medidas de fluxo e difusão em wormholes e também fraturas ácidas, os meios mais utilizados para aumento de produtividade em extração de petróleo.

Palavras-chave: Imagens por ressonância magnética. Meios porosos. Acidificação.

Referências:

1 MITCHELL, J. et al. Magnetic resonance imaging in laboratory petrophysical core analysis. **Physics**



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Reports, v. 526, n. 3, p. 165-225, 2013.

PG147

Discriminating astrophysical scenarios with number of muons measurements in ultra high energy cosmic rays experiments

PRADO, R. R.¹; CONCEIÇÃO, R.²; PIMENTA, M.²; SOUZA, V.¹

raul.prado@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas, Lisboa, Portugal

Over the last decades, the study of ultra high energy cosmic rays (UHECR) has contributed substantially to our understanding of both the astrophysical environment and the fundamental interactions of nature. The largest experiment designed to study these astroparticles is the Pierre Auger Observatory (1), which is located in Malargue, Argentina. After 10 years of data taking, Auger has provided very important results concerning, for example, the energy spectrum of UHECR, which has been accurately measured. (2) The two features observed in the spectrum, known as "ankle" and "GZK suppression", allow plenty of astrophysical interpretations, which, in turn, give different predictions on the cosmic rays composition. Since the cosmic rays measurements have to be done indirectly, through the particle cascades initiated by the interaction of the primary cosmic ray with the atmosphere, the inference of primary particle composition is strongly complicated by statistical fluctuations and systematic uncertainties. Hence, the current composition measurements, which are mostly based on one unique observable (X_{max}) (3), turn out to be insufficient to discriminate among the several proposed astrophysical scenarios. In this context, the Auger Collaboration decided to update the experiment by installing new detectors that are able to measure the number of muons (N_μ) in the particle cascades, which in the future will complement the composition analyses. However, the interpretation of cascade observables are greatly dependent on the Monte Carlo simulations and it is well known that the high energy hadronic interaction models do not describe correctly the cascades muonic component. In this work, we address this problem of interpreting the N_μ measurements in order to provide an efficient tool to be applied to data in the future. We first developed a model to describe the energy evolution of the first and second moments of the N_μ distributions. In this model, we maintain the common features observed in the simulations, while the discrepant ones are made free to change. Thus, it is possible to predict the energy evolution of N_μ average and variance for a given composition scenario with two free parameters and then compare this prediction with data. The comparison is made by means of the traditional χ^2 , which is minimized as a functions of the free parameters. To determine which composition scenario is the one most favorable by data, we compare the value of χ^2 obtained from each one. In this presentation, our method's efficiency is demonstrated by applying it to the simulations considering a number of composition scenarios taken from the literature, and, particularly, it is shown its stability under systematic uncertainties on reconstructed energy and absolute number of muons.

Keywords: Cosmic rays. Composition. Number of muons.

Referências:

- 1 ABRAHAM, J. et al. Properties and performance of the prototype instrument for Pierre Auger Observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, v. 523, n. 1, p. 50, 2004. doi: 10.1016/j.nima.2003.12.012.
- 2 ABRAHAM, J. et al. Measurement of the energy spectrum of cosmic rays above 10^{18} eV using the Pierre Auger Observatory. **Physics Letters B**, v. 685, n. 4, p. 239, 2010. doi: 10.1016/j.physletb.2010.02.013.
- 3 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. doi: 10.1103/PhysRevD.90.122005.

PG148

Estudos funcionais e estruturais de uma endoglucanase da família GH45 das hidrolases de glicosídeos

RAMIA, M. P.¹; GODOY, A.¹; CAMILO, C. M.¹; KADOWAKI, M.¹; POLIKARPOV, I.¹

marinapramia@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

As celulasas são enzimas que conseguem degradar a fibra da celulose, decompondo-a em unidades menores, que podem ser fermentadas, a fim de produzir etanol de segunda geração. Como a celulose é a molécula mais abundante da natureza, as celulasas têm se tornado intensos alvos de estudo. Muitas famílias de celulasas já foram bem caracterizadas, enquanto que outras permanecem ainda desconhecidas. Dentre estas últimas, a família 45 das hidrolases de glicosídeos possui apenas quatro estruturas cristalográficas resolvidas. Essa ausência de informação estrutural dificulta o entendimento do mecanismo de ação dessas enzimas. Recentemente foi proposta a divisão dessa família em três subfamílias (1) e, até agora, apenas membros das subfamília A tiveram enzimas estruturalmente elucidadas. No mecanismo de ação dessas enzimas, ocorre a inversão do carbono anomérico, onde um aspartato age como ácido (Asp121) e outro como base, ativando uma molécula de água para o ataque nucleofílico (Asp10). (2) Nesse trabalho reportamos a estrutura cristalográfica da proteína recombinante endoglucanase de *Phanerochaete chrysosporium* (PcCel45A), a primeira das hidrolases de glicosídeos da subfamília C, e seu complexo com celobiose a 1,4 Å e 1,7 Å de resolução, respectivamente. PcCel45A é uma enzima de domínio único, com uma estrutura em beta-barril e seu empacotamento geral remete a uma esfera achatada. O sítio ativo da enzima forma um longo sulco na superfície da estrutura, sendo que o seu centro catalítico é diferente das outras enzimas publicadas dessa família e um dos resíduos catalíticos (Asp10) não é conservado. Adicionalmente, a estrutura cristalográfica dessa enzima apresenta mais similaridades com as beta-expansinas (proteínas de plantas) e transglicosilases líticas (proteínas que clivam o peptidoglicano de bactérias) do que com as outras representantes da família 45, o que a torna ainda mais inovadora. Para entendermos melhor seu funcionamento foram realizadas mutações sítio-dirigidas nos principais resíduos do sítio ativo. Suas atividades foram comparadas e foi realizado a análise dos produtos liberados pela clivagem da enzima nativa e mutantes.

Palavras-chave: Endoglucanase V . Família 45. Expansinas.

Referências:

1 IGARASHI, K. T. et al. Characterization of an endoglucanase belonging to a new subfamily of glycoside hydrolase family 45 of the basidiomycete *Phanerochaete chrysosporium*. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 74, n. 18, p. 5628 - 5634, 2008.

2 DAVIES, G. J. et al. Structures of oligosaccharide-bound forms of the endoglucanase V from *Humicola insolens* at 1.9 Å resolution. **Biochemistry**, v. 34, n. 49, p. 16210-16220, 1995. doi: 10.1021/bi00049a037.

PG149

Otimização de parâmetros para medidas DP-LIBS em folhas de soja

RANULFI, A. C.¹; NICOLODELLI, G.²; SEILER, R. M. B.²; ZANIN, J.²; MAGALHÃES, A. B.²; MILORI, D. M. B. P.²

aniranulfi@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP e Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

²Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

A economia brasileira é fortemente dependente do agronegócio, com aproximadamente 22% de sua riqueza promovida pelo campo. Neste cenário, o cultivo da soja ganhou destaque, sendo um dos principais motores para o crescimento do setor. Só em 2014, a soja foi responsável por cerca de 32,5% do total das exportações agrícolas brasileiras e a produção recorde manteve o Brasil como segundo colocado no ranking de produtores do grão. (1) Porém, tal desempenho pode ser afetado pela presença de doenças e pragas na lavoura. Atualmente, uma das principais doenças da soja é conhecida como soja louca II. É uma doença ainda sem agente causal confirmado, que impede a formação de vagens e a finalização do ciclo reprodutivo da planta afetada (2), e cujo manejo depende de uma melhor caracterização da doença. Dessa maneira, não há como prescindir de tecnologias e conhecimentos que tornem o processo de produção no campo mais eficiente e sustentável, e que permitam o monitoramento da plantação. Ferramentas espectroscópicas são muito interessantes para o desenvolvimento de instrumentação para análises em campo pelo seu alto potencial de compactação, baixo custo de análise e preparo de amostra simples. Sendo assim, a Espectroscopia de Emissão Óptica com Plasma Induzido por Laser (3) (LIBS, do inglês *Laser-induced Breakdown Spectroscopy*) pode ser aplicada para análise de pastilhas de folhas de soja na busca de características nutricionais das amostras que permitam caracterizar a doença, auxiliar no diagnóstico e também ajudar na compreensão da forma de ação da mesma na planta. Esta é uma técnica espectroanalítica que emprega a microamostragem por ablação com laser e subsequente excitação das espécies presentes no microplasma durante e/ou imediatamente após a ablação. Diversos métodos, tais como a configuração de excitação com duplo pulso, têm sido utilizados, a fim de melhorar a sensibilidade do sinal LIBS. Dessa maneira, o objetivo deste trabalho foi otimizar parâmetros fundamentais, tais como o comprimento de onda de excitação, o tempo de atraso e o tempo de defasagem entre os pulsos, que influenciam a técnica de LIBS com pulso duplo (DP-LIBS) na configuração de feixe colinear quando aplicado à análise de folhas de soja à atmosfera ambiente. Além disso, foi realizado um estudo comparativo entre LIBS pulso único convencional (SP-LIBS) e DP-LIBS. A otimização do sistema de DP-LIBS, permitiu a análise das amostras de folhas de soja e a identificação de diferentes elementos, tais como Ca e Mg, com maior precisão dos dados e com uma qualidade superior do sinal. Em geral, o sistema de DP-LIBS colinear melhorou o desempenho de análise da técnica, aumentando a intensidade das linhas de emissão dos elementos, quando comparado com SP-LIBS. Com os parâmetros utilizados, esse aumento chegou a 100% na intensidade de algumas linhas de emissão, o que torna a análise mais precisa.

Palavras-chave: Soja. Avaliação nutricional. LIBS.

Referências:

1 MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO. **Produção da soja no mundo**. Disponível em: <<http://www.cnpso.embrapa.br/sojaemnumeros/app/graf4.html>>. Acesso em: 18 ago. 2015.

2 MAPA, S.; LANDGRAF, L. **Pesquisa identifica provável causa da soja louca 2**. Disponível em: <<https://www.embrapa.br/busca-de-noticias/-/noticia/3437451/pesquisa-identifica-provavel-causa-da-soja-louca-2>>. Acesso em: 17 ago. 2015.

3 SANTOS JUNIOR, D. S.; TARELHO, L. V. G.; KRUG, F. J.; MILORI, D. M. B. P; MARTIN NETO, L.; VIEIRA JUNIOR, N. D. Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por laser (LIBS): fundamentos, aplicações e perspectivas. **Revista Analytica**, v. 5, n. 24, p. 72-81, 2006.

PG150

First-principles investigation of the adsorption properties of TM clusters on graphene

REGO, C. R. C.¹; OLIVEIRA, L. N. de¹; TERESHCHUK, P.²; SILVA, J. L. F. da²

celsoricardorego@bol.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de São Carlos - USP

Transition-metal (TM) nanoparticles supported on Graphene (G) sheets open new possibilities for the development of fuel-cell electrocatalysts. To date, only few theoretical studies have been reported for TM on G, in which several questions concerning binding mechanism still remain unclear. To improve our knowledge about TM-G binding mechanism we performed a systematic investigation of the adsorption, structural, and magnetic properties of small Ni_n, Pd_n, and Pt_n clusters (n=1-6) on G using DFT calculations with the GGA-PBE approximation (1) and van der Waals (vdW) correction proposed in (2) (TS+SCS). The G sheet was modeled using a periodic unit cell containing 72 carbon atoms with a distance of 16 (Å) between neighboring layers. We obtained the C-C bond in a G layer of 2.466 (Å), in good agreement with experimental results. (2) The stabilities of the clusters in Gas-phase were analyzed considering the binding energy. Our results shown that the binding energy increases with the cluster size, which is expected. The majority of the TM clusters of a certain size and shape supported on graphene layer are preferentially absorbed—the TM atoms in touch with graphene—on the bridge site. The exceptions are Ni₁ and Ni₂, which are adsorbed on a hollow site. Our adsorption energy, of a TM cluster supported on G, per atom, was estimated as the total energy of TM-G minus the sum of the total energy of the clean G layer with the total energy of the ground state structure of TM cluster. We found values for Ni, Pd and Pt, varying from 1.47, 1.14, 1.63 up to 0.16, 0.14, 0.11 (eV/atom), respectively. This suggests that the bonding is physical, and so we naturally expected the van der Waals forces to be important, which was confirmed with the TS+SSC correction. The vdW correction does not affect (i) the distances between the C atoms in G, (ii) the C-TM separation or (iii) the cluster adsorption site, but the adsorption energy grows. In addition, we have performed bader-charge analysis (3) for aforementioned systems and its results showed that the charge transfer occur mainly inside the TM cluster and between the TM and C.

Keywords: Density functional theory. Graphene. Transition metals.

Referências:

1 PERDEW, J. P. ; BURKE, K.; EMZERHOF, M.. Generalized gradient approximation made simple. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 18, p. 3865, 1996.

2 BUCKO, T.; LÈBEGUE, S.; HAFNER, J.; ÁNGYÁN, J. G. Tkatchenko-Scheffler van der Waals correction method with and without self-consistent screening applied to solids. **Physical Review B**, v.

87, n. 064110, p. 1, 2013.

3 HENKELMAN, G.; ARNALDSSON, A.; JÓNSSON.H. A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density. **Computational Materials Science**, v. 36, n. 3, p. 354, 2006.

PG151

Heterologous production, biophysics and structural characterization of xylose isomerase with potential for application in industrial fermentation of pentose

REIS, C. V.¹; POLIKARPOV, I.¹

caio.reis@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

We are part of a global scenario in which depletion supplies of fossil fuels concerns different sectors of trade, industry, government and institutions in defense of the environment. In this respect, the search for new renewable energy sources has directed several surveys, in addition to drain billions of dollars in investments. One of the most important research lines is the production of second generation ethanol (2G), an ethanol produced from waste generated in the production of the first generation one. In Brazil, the residues comprise mainly straw and bagasse from sugarcane; such biomass is mostly composed mainly of cellulose (45%), hemicellulose (25%) and lignin (20 %) and a suitable hydrolysis involves pretreatment and the use of enzymes that act specifically on their targets. (1) Thus, ethanol productivity increases without necessarily extend cultivation areas. This is very promising, but the costs are still relatively high and applicability still depends on large adaptations of the industrial sector and improvements in the production itself (specific activity of the enzymes and their synergistic action). The main objective of this project is to recognize and map the molecular basis who run the xylose isomerase activity (XI), which converts xylose (majority presence in hemicellulose) to xylulose, allowing the use of this by *Saccharomyces cerevisiae* (as xylose is not fermentable (2)) to obtain the second-generation ethanol as the final product. For this purpose, an extensive search of genes coding for XI from various microorganisms was conducted. Most genes was amplified, cloned into specific vectors and transformed into *Escherichia coli* ROSETTA (DE3). From these transformed strains, the production of XI of interest was successfully. Thus, it was possible to initiate crystallization tests and the solution of crystal structures. These results must be crossed and correlated with the enzymatic and chemical kinetic activity, providing good perspective for understanding the molecular basis of this enzyme activity.

Keywords: Bioethanol. Xylose isomerase. Hemicellulose.

Referências:

- 1 CHANDRAKANT, P.; BISARIA, V. S. Simultaneous bioconversion of cellulose and hemicellulose to ethanol. **Critical Reviews in Biotechnology**, v. 18, n. 4, p. 295-331, 1998. doi: 10.1080/0738-859891224185.
- 2 JEFFRIES, T. W.; SHI, N. Q. Genetic engineering for improved xylose fermentation by yeasts. **Advances in Biochemical Engineering / Biotechnology**, v. 65, p. 117-161, 1999.

PG152

Otimização da terapia fotodinâmica para câncer de pele através de dispositivos mecânicos: experimentação animal e estudo clínico

REQUENA, M. B.¹; VOLLET FILHO, J. D.¹; RUSSIGNOLI, P.²; KURACHI, C.¹; MENEZES, P. F. C.¹; BAGNATO, V. S.¹

michelle@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Medicina - UFSCar

A aplicação tópica de precursores da Protoporfirina IX (PpIX) é comumente utilizada para o tratamento de lesões superficiais pré-malignas e câncer de pele não-melanoma com Terapia Fotodinâmica (TFD). Contudo, uma das limitações clínicas de utilização de TFD, nestas condições, é o longo tempo de tratamento, uma vez que o protocolo utilizado para a aplicação de ALA e M-ALA na pele é de três horas para o tempo de incubação destes pro fármacos somados ao tempo de irradiação e de preparação do paciente. (1) Além disso é importante salientar que normalmente são necessárias mais de uma sessão para o tratamento completo. O principal objetivo deste trabalho é diminuir o tempo de incubação para a formação da PpIX na pele utilizando para isso dispositivos mecânicos que otimizam a entrega transdérmica de soluções de ALA e M-ALA. Este projeto visa utilizar dois tipos de dispositivos para a disponibilização das soluções: 1) injeção de alta pressão (SAFE-INJECT, Injex Pharma, Alemanha) e 2) dermografo (Dermomag Pen Júnior, Mag Estética). A veiculação destes precursores utilizando um dermografo é feita pela inserção do líquido por efeitos alternados de pressão mecânica e vibracional através da inserção de agulhas com diferentes tipos de pontas na pele. Enquanto o sistema de injeção a ser utilizado, faz a introdução do líquido por pressão sem o uso de agulhas. Serão realizados experimentos em suínos para determinação de protocolos e aplicação clínica voluntários humanos com lesões pré cancerígenas (queratose actínica) e cancerígenas bem como em pele normal envelhecida. O sucesso do uso da injeção com a aplicação de ALA para o tratamento de condiloma acuminado com TFD já é relatado na literatura, reduzindo o tempo de incubação para 90 minutos. (2) A disponibilização de medicamentos pelo dermografo mostrou-se viável para o tratamento de leishmaniose bem como em tratamentos de remoção de tatuagem. (3) Estes resultados são promissores e motivam o uso de dispositivos mecânicos para aplicação em TFD, além de serem ferramentas acessíveis no mercado e com custo baixo de compra e manutenção.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Otimização. Dispositivos mecânicos.

Referências:

1 RAMIREZ, D. P. et al. Experience and BCC subtypes as determinants of MAL-PDT response: preliminary results of a national Brazilian project. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 11, n. 1, p. 22-26, 2014.

2 LI, X. et al. Needle-free injection of 5-aminolevulinic acid in photodynamic therapy for the treatment of condylomata acuminata. **Experimental and Therapeutic Medicine**, v. 6, n. 1, p. 236-240, 2013.

3 SOHL, S. et al. Photodynamic treatment of cutaneous leishmaniasis. **Journal of the German Society of Dermatology**, v. 5, n. 2, p. 128-130, 2007.

PG153

Conjugation of nanocapsules with tumor targets for cancer diagnosis and therapy

RIBOVSKI, L.¹; BERNARDI, J. C.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

laisribovski@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Cancer is the leading cause of death in economically developed countries and in less developed countries. According to the GLOBOCAN 2012, the International Agency for Research on Cancer, there was an estimative of 14.1 million new cancer cases around the world in 2012, and this number is expected to increase to 21.4 million by 2030.¹ Statistics show that this increase is related to the ageing of world population combined with risk factors such as sedentary lifestyle, overweight, and smoking. (1-2) Although cancer treatments have been constantly evolving they are still aggressive, harm healthy cells besides cancer cells, and require constant administration of high doses of chemotherapy drugs to increase treatment effectiveness. (3) Due to this scenario, the search for new selective drugs to enhance cancer treatments is one of the major current challenges in medicine. Herein, we are developing a nanocapsule for chemotherapy that is able to target lung cancer cells. For this, three different therapeutic target systems have been tested - transferrin (Tf) and transferrin receptor (TfR), epithelial cell adhesion molecule (EpCAM) and anti-EpCAM and S100 and anti-S100 - conjugated to polymeric nanocapsules loaded with doxorubicin hydrochloride (Dox), paclitaxel (Ptx) or cisplatin (Cis), some of the most common chemotherapy drugs used to treat lung cancer. To analyze the potential of the proposed treatment, in vitro tests will be performed in lung cancer cells and healthy ones. Cell response will be investigated by flow cytometry, fluorescence and microscopy while nanocapsules and conjugated nanocapsules are characterized using spectroscopy techniques, dynamic light scattering (DLS), microscopy and isothermal titration calorimetry (ITC). Moreover, tumors response against the drug loaded conjugated nanocapsules will be evaluated in vivo to determine possible toxic effects and complex systems reactions by histologic and bioluminescent tests using immunodeficient mice. By combining the attractive properties of polymeric nanocapsules and therapeutic targets to obtain drug-delivery systems, a new opportunity for cancer treatment opens up.

Keywords: Multifunctional nanoparticles. Cancer receptors. Nanomedicine.

Referências:

- 1 TORRE, L. A.; BRAY, F.; SIEGEL, R. L.; FERLAY, J.; LORTET-TIEULENT, J.; JEMAL, A. Global cancer statistics, 2012. **CA: A Cancer Journal for Clinicians**, v. 65, n. 2, p. 87-108, 2015.
- 2 JEMAL, A.; BRAY, F.; CENTER, M. M.; FERLAY, J.; WARD, E.; FORMAN, D. Global cancer statistics. **CA: A Cancer Journal for Clinicians**, v. 61, n. 2, p. 69-90, 2011.
- 3 FREI III, E.; CANELLOS, G. P. Dose: a critical factor in cancer chemotherapy. **The American**



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Journal of Medicine, v. 69, n. 4, p. 585-594, 1980.

PG154

Ordenamento estrutural e propriedade dielétrica em microondas dos sistemas $(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ e $(\text{Ba}_{1-y}\text{La}_y)_3\text{Ca}_{1+y}\text{Nb}_{2-y}\text{O}_9$

RODRIGUES, J. E. F. S.¹; HERNANDES, A. C.¹

rodrigues.joaaoelias@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

No presente trabalho, as soluções sólidas $(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ ($x = 0; 0,30; 0,50; 0,70; 0,90; 1,00$) [BSCN] e $(\text{Ba}_{1-y}\text{La}_y)_3\text{Ca}_{1+y}\text{Nb}_{2-y}\text{O}_9$ ($y = 0; 0,02; 0,05; 0,10; 0,30; 0,50$) [BLCN] foram sintetizadas pelo método convencional de reação no estado sólido. Tais composições foram investigadas objetivando potenciais aplicações como ressoadores dielétricos em circuitos operando em microondas. (1) As técnicas de difração de raios X e espalhamento Raman à temperatura ambiente foram empregadas na caracterização estrutural dos pós calcinados, primando pela averiguação dos efeitos de ordem/desordem na estrutura cristalina dessas perovskitas complexas. A interpretação do fenômeno do ordenamento estrutural foi conduzida através método da análise do grupo fator, primando pela determinação da distribuição de fônons no centro da primeira zona de Brillouin ($\Gamma = 0$). Os resultados obtidos evidenciaram a ocorrência da transição de fase trigonal (D_{3d}^3) $\rightarrow$ monoclinica (C_{2h}^3) para $x \geq 0,7$ na solução $(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$. Esta transição é induzida por inclinações octaédricas pertencentes ao sistema $\mathbf{a}^0\mathbf{b}^-\mathbf{b}^-$, mantendo, todavia, o ordenamento catiônico 1:2 dos íons Ca^{2+} e Nb^{5+} . Não obstante, a coexistência de domínios ordenados do tipo 1:1 (cúbico) e 1:2 (trigonal) foi constatada nos sistemas $(\text{Ba}_{1-y}\text{La}_y)_3\text{Ca}_{1+y}\text{Nb}_{2-y}\text{O}_9$. Para $y = 0,50$, a fase obtida foi condizente com uma estrutura cúbica O_h^5 , com distorções monoclinicas associadas às inclinações octaédricas do sistema de Glazer $\mathbf{a}^0\mathbf{b}^-\mathbf{b}^-$, sendo assim descrita pela estrutura monoclinica C_{2h}^3 . Os domínios ordenados 1:1 foram verificados nos sistemas $\text{Ba}_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ e $\text{Sr}_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ mediante o aparecimento da banda Raman em 773 cm^{-1} . Tal fenômeno foi explicado a partir da variação local da vizinhança assimétrica dos íons Nb^{5+} , sendo C_{3v} para a fase D_{3d}^3 e C_S para C_{2h}^3 , tendo em vista a acomodação de octaedros de Nb^{5+} com vizinhança simétrica O_h . As etapas posteriores do trabalho compreendem a caracterização dielétrica em frequências de microondas das cerâmicas densas dos sistemas BSCN e BLCN, visando o estabelecimento de correlações entre estrutura, composição e propriedade física.

Palavras-chave: Perovskita complexa. Ressorador dielétrico. Ordenamento estrutural.

Referências:

1 SEBASTIAN, M. **Dielectric materials for wireless communication**. London: Elsevier, 2008. 688 p.

PG155

Modelo farmacofórico e triagem virtual baseados na estrutura da enzima PtpA de *Mycobacterium tuberculosis*

RODRIGUES, V. K. T.¹; GUIDO, R. V. C.¹

vahkiraly@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A tuberculose é um grave problema de saúde pública, sendo a segunda maior causa de morte entre doenças infecto contagiosas, ficando atrás somente da infecção pelo vírus de imunodeficiência humana. As últimas estimativas apresentadas no Relatório Global da Tuberculose de 2014 são de que existiam 9 milhões de novos casos e aproximadamente 1,5 milhão de mortes causadas por tuberculose em 2013. O tratamento inadequado da doença favoreceu o surgimento de cepas resistentes aos fármacos utilizados no tratamento padrão atual. Portanto, faz-se extremamente necessário a identificação de novos alvos moleculares e fármacos que sejam eficazes frente à essas cepas resistentes. (1) Para tanto, a partir da análise do genoma do *M. tuberculosis*, foram identificadas duas proteínas tirosinas fosfatases (PtpA e PtpB), responsáveis pela sobrevivência nos macrófagos do hospedeiro. (2) A inativação dos genes que codificam essas proteínas inviabilizou a sobrevivência do *M. tuberculosis* nos macrófagos, validando as Ptps como alvos terapêuticos atrativos para o desenvolvimento de novos fármacos. (2,3) Nesse trabalho, foram iniciados os estudos de planejamento baseado na estrutura do alvo receptor (SBDD, do inglês, *structure-based drug design*) com a enzima PtpA, utilizando sua estrutura 3D (PDB ID, 1U2P) para estudos de modelagem molecular e construção de um modelo farmacofórico 3D. A primeira etapa do processo de construção do modelo farmacofórico 3D foi o mapeamento do sítio catalítico da enzima alvo (PtpA). Para tanto, utilizamos o protocolo protomol disponível no programa Surflex-Dock, que possui sondas moleculares capazes de identificar regiões favoráveis para interação com grupos hidrofóbicos, doadores e aceptores de ligação de hidrogênio (i.e., Csp3, NH e C=O, respectivamente). A avaliação sistemática do sítio catalítico identificou: (i) três regiões favoráveis para interação com grupos doadores de ligação de hidrogênio (cadeia lateral da His 49, Asp90 e Asp126); (ii) três regiões favoráveis para interação com grupos aceptores de ligação de hidrogênio (cadeia principal da Gly13, Ile15, Cys16 e Asp126 e cadeia lateral da Thr12, Arg17, His93 e Tyr129); e (iii) uma região favorável para interação com grupos hidrofóbicos (cadeia lateral da Ile15, Cys16 e Tyr128). Essa hipótese farmacofórica foi avaliada utilizando-se as ferramentas de busca 3D do programa UNITY (plataforma SYBYL 8.0). A base de dados utilizada foi o subconjunto Leads-Now da base de dados ZINC (43.910 compostos) que apresenta características físico-químicas atrativas para a descoberta de candidatos a novos compostos líderes. Os modos de ligação dos candidatos a ligantes foram modelados no sítio ativo da PtpA com auxílio do programa de docagem molecular Glide. Um conjunto de 8 candidatos a ligantes que apresentaram conformações de menor energia complementares ao modelo farmacofórico 3D foram selecionados para os ensaios experimentais de inibição. O modelo farmacofórico gerado é uma ferramenta importante no entendimento das interações intermoleculares predominantes nesse sistema de alta complexidade, sendo útil na integração com técnicas de ensaio virtual e síntese planejada para identificação e obtenção de novos inibidores para a PtpA como candidatos a novos fármacos para o tratamento da tuberculose.

Palavras-chave: Tuberculose. Proteínas tirosina fosfatases. Farmacóforo.

Referências:

- 1 MELO, F. A .F. et al. Epidemiologia. In: _____. **Tuberculose multirresistente:** guia de vigilância epidemiológica. Rio de Janeiro: Centro de Referência Professor Hélio Fraga, 2007. cap. 1, 14-18 p.
- 2 MASCARELLO, A. et al. Inhibition of *Mycobacterium tuberculosis* tyrosine phosphatase PtpA by synthetic chalcones: Kinetics, molecular modeling, toxicity and effect on growth. **Bioorganic and Medicinal Chemistry**, v. 18, n. 11, p. 3783-3789, 2010.
- 3 MADHURANTAKAM, C. et al. Crystal structure of low-molecular-weight protein tyrosine phosphatase from *Mycobacterium tuberculosis* at 1.9-Å resolution. **Journal of Bacteriology**, v. 187, n. 6, p. 2175-2181, 2005.

PG156

Brazilian atomic fountain - second generation

RODRIGUEZ S, A.¹; BUENO, C.²; LARENAS, M. C.²; BAGNATO, V. S.¹; MULLER, S.²; MAGALHÃES, D. V.²

andresro@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Escola de Engenharia de São Carlos - USP

The goal this work is accomplish a Brazilian atomic Cesium Fountain-Second Generation(1), for this, we have made some improvements in optical and vacuum systems. In the optical system, we realized improve in the configuration optical table, which comprises the optical system in new optical table of stainless steel replacing of old marble table(2), this changes we allowed have optical system more compact, consequently increase stability of the lasers systems. After of realized this changes, we made magneto-optical trapping MOT which load a number atoms around of $n = 10^8$ in a time of $t = 2$ s with temperature $T = 120 \mu\text{K}$. Now the systems is ready again for to make time of flight (tof) and take Ramsey Profile. In the vacuum system a new vacuum chamber was performed with new concept for chamber this type. On the other hand, a new Ramsey method of interferometry of separate fields propose for Mugas (3) will be test, this method is a variation of conventional Ramsey method, where it introduce a symmetric detuning with opposite sing in each passage of atomic cloud into interrogation region. Furthermore, a new parameter is introduce in the width of central pick the Ramsey profile, this parameter is the entrance time, which is defined as the wait time of the atoms before of interact with the first oscillate field. The purpose of this new method is reduce the width central Ramsey profile compared to the usual method; hence, we will study its effects.

Keywords: Atomic clock. Time and frequency standard. Cold atoms.

Referências:

1 MAGALHÃES, D. V. **Desenvolvimento de uma fountain atômica para utilização como Padrão Primário**. 2004. 167p. Teses (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.

2 BEBEACHIBULI, A. **Espectroscopia de uma fountain atômica para utilização como padrão primário de tempo**. 2007. 127p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

3 SEIDEL, D; MUGA, J. G. Two-frequency Ramsey interferometry. **Physics Review A**, v. 75, p. 23811-23818, 2007.

PG157

Crystal structure of Adenylosuccinate Lyase apo form from *Schistosoma mansoni*: a potential chemotherapeutic target

ROMANELLO, L.¹; TORINI, J.¹; BIRD, L.²; NETTLESHIP, J.²; OWENS, R.²; REDDIVARI, Y.²; BRANDÃO NETO, J.³; PEREIRA, H. M.¹

larissa.romanello@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Oxford Protein Production Facility UK, Didcot - Oxfordshire

³Diamond Light Source. Harwell Science and Innovation Campus Didcot - Oxfordshire

Schistosomiasis is a disease that affects about 207 million people worldwide (1), *Schistosoma mansoni* is the parasite responsible for it and does not have the purine synthesis pathway, depending entirely on the purine salvage pathway to supply its purine demands. (2) The purine salvage pathway has been reported as a potential target for developing new drugs against schistosomiasis. (3) Adenylosuccinate lyase (SmADSL) is an enzyme in this pathway, that cleaves adenylosuccinate into adenosine 5'-monophosphate and fumarate. This project is part of a project aimed obtaining the structures three-dimensional of all enzymes of purine salvage pathway from the parasite. ADSL was amplified, cloned, expressed and purified at the Oxford Protein Production Facility (OPPF) in Harwell - UK. Robotic crystallization trials were performed and SmADSL APO crystallized in several conditions of the Morpheus crystallization kit. Several crystals were screened with x-rays and one dataset was collected for a crystal grown in the condition F2 (0,12M of monosaccharides, 0,1M of MES/imidazole pH6.5, 30% of Ethylene glycol and PEG8000), on the macromolecular crystallography beamline I04-1 at Diamond up to 2.14 Å resolution. The crystal belongs to the P21212 space group, with two monomer in the ASU. The structure was solved by the program Phaser using SmADSL with AMP previously solved in our group as a search model. The refinement is currently by program Phenix and Coot. The structure consists almost entirely of alpha-helices and only 2 beta-sheet, divided into 3 domains and this is the only enzyme in this pathway to catalyze two separate reactions, both reactions catalyzed by adenylosuccinate lyase involve the beta-elimination of fumarate. Enzymes that catalyze this type of reaction belong to a superfamily, the members of which are homotetramers. This structure will increase the structural information available about the *Schistosoma mansoni* purine salvage pathway.

Keywords: *Schistosoma mansoni*. Purine salvage pathway. Adenylosuccinate lyase.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION.WHO. **Schistosomiasis**. 2010. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/>>. Acesso em: 17 ago. 2015..

2 SENFT, A. W et al. Purine metabolism in *Schistosoma mansoni*. **International Journal Parasitology**

, v. 2, n. 2, p. 249-260, 1972.

3 SENFT, A. W.; MIECH, R. P. Pathways of nucleotide metabolism in *Schistosoma mansoni* II: disposition of adenosine by whole worms. . **Biochemical Pharmacology**, v. 22, n. 3, p. 437-447, 1973.

PG158

Dinâmica de transporte de fotossensibilizadores em células por meio de microscopia confocal e espectroscopia de fluorescência correlacionada

ROMANO, R. A.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹; GUIMARÃES, F. E. G.¹; BAGNATO, V. S.¹

renan.romano@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nos últimos anos os estudos de técnicas fotônicas não invasivas têm ganhado destaque devido à grande preocupação com a saúde. Nestes estudos, o uso de fotossensibilizadores na terapia fotodinâmica desempenha um papel fundamental para os avanços da área e tem sido utilizado com sucesso em diversas aplicações, tais como remoção de contaminantes ambientais, descontaminação de alimentos e tratamento de infecções localizadas, infecções fúngicas, acnes e câncer. Apesar de tal sucesso, a dinâmica de transporte destas substâncias fotossensíveis nos alvos a serem tratados ainda não é um processo completamente compreendido. Assim, torna-se importante estudar a dinâmica de difusão e entrada destes fotossensibilizadores em células e bactérias. Neste projeto, pretende-se utilizar técnicas como microscopia confocal e espectroscopia de fluorescência correlacionada (FCS, acrônimo do inglês Fluorescence Correlation Spectroscopy) de modo a compreender tal transporte em bactérias gram-positivas e gram-negativas e buscar diferenças na dinâmica de difusão entre elas, do mesmo modo comparativo também serão estudadas células tumorais e sadias. A primeira técnica baseia-se no uso de um laser para iluminar a amostra ponto a ponto, o sistema de detecção capta então a fluorescência da amostra, porém rejeita a luz emitida fora do ponto focal através da inserção de um anteparo, onde apenas a luz provinda do ponto focal é detectada. Esta técnica cria imagens nítidas que representam uma seção transversal fina do espécime analisado. Além disso, é possível construir imagens tridimensionais de um volume da amostra pelo empilhamento de uma série de fatias finas tomadas ao longo do eixo vertical. (1) A segunda técnica (FCS) é um modo de obter alta resolução espacial e temporal de biomoléculas em concentrações extremamente baixas. Ao contrário de outras técnicas de fluorescência, o parâmetro de maior interesse não é a intensidade da emissão por si própria, mas ao invés disso as flutuações espontâneas de intensidade causada por pequenas variações do sistema. Em geral, todos os parâmetros físicos que dão origem a flutuações no sinal de fluorescência são acessíveis por FCS. (2) Deste modo, torna-se bastante simples determinar as concentrações locais, coeficientes de mobilidade, inter- ou intramoleculares. Os fotossensibilizadores a serem estudados neste projeto serão um derivado de hematoporfirina (Photogem) e uma clorina (PDZ), além disso, serão utilizadas as células e bactérias. Espera-se com este projeto caracterizar e modelar toda a dinâmica de transporte destes fotossensibilizadores em bactérias gram-positivas e gram-negativas, assim como em células sadias e tumorais, buscando encontrar diferenças entre os grupos de modo a possibilitar a seletividade de um único grupo de interesse para terapia fotodinâmica.

Palavras-chave: Espectroscopia de fluorescência de correlação. Microscopia confocal. Transporte de fotossensibilizadores.

Referências:

- 1 PAWLEY, J. B.; MASTERS, B. R. **Handbook of biological confocal microscopy**. New York: Plenum Press, 1995. 632 p.
- 2 BERLAND, K. M.; SO, P. T.; GRATTON, E. Two-photon fluorescence correlation spectroscopy: method and application to the intracellular environment. **Biophysical Journal**, v. 68, n. 2, p. 694-701, 1995.

PG159

Comparação de redes complexas aplicadas à interação de proteínas.

RONQUI, J. R. F.¹; BAGNATO, G. G.¹; TRAVIESO, G.¹

jose.ronqui@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Redes complexas são modelos matemáticos que utilizam grafos para representar sistemas compostos de elementos que interagem entre si. (1) Na natureza existem diversos exemplos de elementos que apresentam este tipo de interação, como por exemplo pessoas e seus laços de amizade, redes de comunicação, páginas na internet, redes gênicas e de interação entre proteínas, interação entre animais como formigas ou pássaros, entre outros. Para obtermos maiores informações e compreendermos melhor este tipo de sistema e os fenômenos que neles ocorrem é comum realizar-se comparações entre os vários tipos de rede utilizando medidas e conceitos desenvolvidos para o estudo dos grafos. (2) O objetivo deste trabalho é empregar redes complexas para estudar e comparar redes de interação entre proteínas, e como suas estruturas evoluem. (3) Os resultados parciais que obtivemos até agora indicam que é possível realizar a caracterização e classificação das redes utilizando as correlações entre suas medidas de centralidade. Utilizando as medidas de importância dos nós (proteínas) da rede como características, realizando uma análise de componentes principais (PCA) obtivemos um padrão na distribuição dos pontos no espaço do PCA que parece se repetir para todos os organismos considerados até agora. Além disso também obtivemos resultados indicando que proteínas pertencentes a uma comunidade podem estar desenvolvendo funções específicas, representando uma associação entre as funções desempenhadas pelas proteínas e a estrutura de ligação entre elas. Como trabalhos futuros e aplicações dos métodos estudados podemos citar a classificação automatizada das funções das proteínas utilizando a estrutura de comunidades e análises evolutivas baseadas na topologia das redes de interação de proteínas.

Palavras-chave: Redes complexas. Medidas de centralidade. Redes de interação de proteínas.

Referências:

- 1 BOCCAETTI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.; CHAVEZ, M.; HWANG D.-U. Complex networks: structure and dynamics. **Physics Reports**, v. 424, p. 175, 2006. doi: 10.1016/j.physrep.2005.10.009.
- 2 NEWMAN, M. **Networks**: an introduction. New York: Oxford University Press, 2010. 772 p.
- 3 VIDAL, M.; CUSIK, M. E.; BARABÁSI, A.-L. Interactome networks and human disease. **Cell**, v. 144, p. 986, 2011. doi: 10.1016/j.cell.2011.02.016.

PG160

Development of a fluorescence lifetime imaging microscope for clinical applications

ROSA, R. G. T.¹; JO, J. A.²; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹

ramongabriel.tr@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Department of Biomedical Engineering - Texas A&M University

Fluorescence based microscopy techniques have been extensively used in biological sciences due to their remarkable capability of investigating biochemical properties of tissues. The most common approach is the steady-state fluorescence microscopy, in which the resulting image contains essentially information about the sample fluorescence spectrum. Although the said approach is very powerful, it is often not enough to identify many chemical processes that may indicate relevant conditions of biological tissues. Furthermore, the fluorescence spectrum of a sample may be affected by the absorption and elastic scattering on both the excitation and emission wavelengths. Going beyond the steady-state approach, however, it is possible to acquire information about the intrinsic properties of the tissue. (1) The fluorescence dynamics analysis is not only less sensitive to the media influence but is sometimes capable of distinguishing between spectrally identical fluorescent structures. However, the Fluorescence Lifetime Imaging Microscopy (FLIM) techniques require a more sophisticated instrumentation, that creates an intrinsic difficulty for the use of such microscopes in clinical environments, specially for in vivo imaging. There are no commercial FLIM systems suitable for such applications. The authors report on the ongoing development and assembly of a compact, high-speed, multispectral FLIM system for in vivo imaging in clinical applications. The system will feature a handheld probe designed to allow the examination of difficult-to-access areas like the cervix. The system will be employed on the diagnosis of several medical conditions.

Keywords: Microscopy. Fluorescence lifetime. In vivo imaging.

Referências:

1 BRYDEGAARD, M. et al. Complete parameterization of temporally and spectrally resolved laser induced fluorescence data with applications in bio-photonics. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 142, p. 95-106, 2015. doi: 10.1016/j.chemolab.2015.01.014.

PG161

Structural insights into the activity mechanism of a dual GGDEF-EAL domain phosphodiesterase from *Salmonella enterica*

ROSSETO, F. R.¹; NAVARRO, M. V. de A. S.¹

rosseto@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The formation of bacterial biofilms is a well-known phenomenon characterized by the formation of a static bacterial community embedded in an exopolymeric matrix. (1) However, this process has only recently been elucidated at the molecular level, revealing a new signaling molecule, c-di-GMP, as a key regulator of mobility, cell adhesion and exopolysaccharide synthesis. (2) Protein domains catalyzing the synthesis (GGDEF) and degradation (EAL and HD-GYP) of c-di-GMP have been identified in a large number of proteins in almost every bacterial genome sequenced to date. These enzymes could be found with isolated GGDEF or EAL domains or associated with regulatory domains. (3) One example is the transmembrane HAMP-GGDEF-EAL containing domains STM3615 from *Salmonella enterica* serovar *typhimurium* LT2. We expressed several soluble STM3615 constructs for structural and biochemical analyses. While the GGDEF domain is degenerated, indicating STM3615 is an inactive cyclase, its EAL domain conserves all key residues essential for catalysis. Enzymatic assays with c-di-GMP confirmed all soluble constructs bearing the EAL domain are active phosphodiesterases. Oligomeric analyses through size-exclusion chromatography (SEC) and small angle x-ray scattering that isolated EAL domain, as well as periplasmic sensor domain and soluble cytoplasmic constructs bearing the HAMP domain are dimers in solution. The structure of dual domain GGDEF-EAL was solved by x-ray crystallography. Compared to other dual domain structures available, the c-di-GMP receptor LapD from *Pseudomonas fluorescens* and the bifunctional enzyme MorA from *Pseudomonas aeruginosa*, STM3615 shows striking differences, suggesting different regulatory activity mechanisms. Our findings about a poorly described subclass of c-di-GMP biosynthetic enzymes increases our understanding about the molecular basis of virulence and biofilm formation in bacteria and could help development of new therapies against chronic infections.

Palavras-chave: Biofilm. c-di-GMP. Phosphodiesterase.

Referências:

- 1 O'TOOLE, G.; KAPLAN, H. B.; KOLTER, R. Biofilm formation as microbial development. **Annual Review Microbiology**, v. 54, p. 49-79, 2000. doi: 0066-4227/00/1001-0049.
- 2 ROSS, P.; MAYER, R.; BENZIMAN, M. Cellulose biosynthesis and function in bacteria. **Microbiol Reviews**, v. 55, n. 1, p. 35-58, 1991. doi: 0146-0749/91/010035-24.
- 3 JENAL, U.; MALONE, J. Mechanisms of cyclic-di-GMP signaling in bacteria. **Annual Review of Genetics**, v. 40, p. 385-407, 2006. doi: 0066-4197/06/1215-0385.

PG162

Engenharia de potenciais confinantes em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades

ROSSETTI, R. F.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

rafael.rossetti@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O objetivo deste projeto é a engenharia de potenciais confinantes em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades. Especificamente, pretendemos implementar os potenciais de Morse e anti-Morse em armadilhas iônicas, a partir do potencial harmônico de uma armadilha do tipo Paul, com foco na possibilidade de controle da correspondente energia de dissociação relacionada ao movimento vibracional do íon. Esta engenharia, que deve ser empreendida unicamente através dos processos de interação radiação-matéria, sem o recurso a qualquer campo externo adicional à armadilha, pode permiti-nos uma manipulação tal do espaço de estados vibracionais do íon que nos propicie novos ingredientes para a engenharia de interações entre estados eletrônicos e vibracionais do íon. (1,2) Consequentemente, pode igualmente propiciar novos ingredientes para a engenharia de reservatórios em armadilhas iônicas. No contexto da eletrodinâmica quântica de cavidades pretendemos, também na ausência de campos externos, aprisionar átomos neutros em cavidades cruzadas (com eixos ópticos perpendiculares entre si). Para isso, assim como nas armadilhas iônicas, devemos recorrer somente à física da interação radiação-matéria. Em particular, objetivamos a engenharia de interações entre um modo da cavidade e átomos de dois níveis que simulem acoplamento do tipo spin-órbita de Rashba ou Dresselhaus, dos quais decorrem o Zitterbewegung não-usual, responsável por órbitas helicoidais de partículas na ausência de campos magnéticos. (3) Por fim, temos também como objetivo a simulação quântica, em armadilhas iônicas e eletrodinâmica quântica de cavidades, de fenômenos como a excitação de Higgs, no primeiro sistema, e do zitterbewegung não-usual no segundo.

Palavras-chave: Zitterbewegung. Armadilhas iônicas. Potenciais confinantes.

Referências:

- 1 LEIBFRIED, D ; BLATT, R ; MONROE, C; WINELAND, D. Quantum dynamics of single trapped ions. **Reviews of Modern Physics**, v. 75, n. 1, p. 281-324, 2003. doi: 10.1103/RevModPhys.75.281.
- 2 GERRITSMA, R.; KIRCHMAIR, G.; ZÄHRINGER, F.; SOLANO, E.; BLATT, R.; ROOS, C. F. Quantum dynamics of the Dirac equation. **Nature**, v. 463, p. 68-71, 2010. doi: 10.1038/nature08688.
- 3 BERNARDES, E.; SCHLIEMANN, J.; LEE, M.; EGUES, J.C.; LOSS, D. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 7, p. 076603-1-076603-4., 2007. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.076603.

PG163

Origin and tuning of the band gaps in transparent conducting oxides: the example of M_2O_3 ($M = Al, Ga, In$)

SABINO, F. P¹; BESSE, R.¹; OLIVEIRA, L. N. de¹; WEI, S. H.²; DA SILVA, J. L. F. D³

fernandopsabino@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²National Renewable Energy Laboratory, Golden, Colorado, USA

³Instituto de Química de São Carlos - USP

High transparency in the visible spectrum and high electrical conductivity are two major characteristics of transparent conducting oxides (TCO). As a rule, highly transparent oxide materials have broad band gaps and, consequently, high conduction band minima (CBM); under such conditions, it is difficult to achieve the level of n -type doping needed to insure good conductivity. Good TCO's, such as $In_2O_3:Sn$ (ITO), are special, for they combine a large optical band gap, which guarantees high transparency, with a relatively low CBM, i. e., a small fundamental band gap. The disparity $\Delta E_g^{OF} = E_g^O - E_g^F$ between the optical and fundamental band gaps is explained by the forbidden optical transitions from the states at the top of the valence band to the conduction-band minimum.⁽¹⁾ No such mismatch is observed in Al_2O_3 and Ga_2O_3 , even though Al, Ga and In belong to the same column of periodical table. We are therefore lead to ask two questions: (i) why are certain optical transitions forbidden in In_2O_3 ; (ii) can we control the disparity between the optical and fundamental band gaps in M_2O_3 ($M = Al, Ga, In$) systems? To address these questions we have used density functional theory (DFT) with the PBE exchange-correlation functional. We have solved the Kohn-Sham equations via the PAW method, as implemented in the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP), and adopted the Hubbard-like on-site model to artificially shift the energetic position of the cation d -states within the band structure. To access the transition matrix element and determine the optical band gap for each system, we have modified the VASP code. Our results show that the disparity between the optical and fundamental band gaps strongly depends on the following three conditions. (i) Inversion symmetry: this symmetry, present in the corundum, gallia and bixbyite crystal structures, of Al_2O_3 , Ga_2O_3 and In_2O_3 , respectively, is important because it determines the wave-function parity. (ii) Conduction-band minimum constituted by cation and O s -states: this constitution leads to an A_g or A_{1g} representation for the CBM, a common characteristic of all systems here studied. (iii) States near the valence-band maximum with strong p - d coupling: the coupling favors valence-band wave-functions with even parity, which forbids optical transitions to the CBM. In_2O_3 , in the bixbyite structure, satisfies the three conditions, so that, as reported in the literature ⁽¹⁾, $\Delta E_g^{OF} = 0.71$ eV. Compared with the d -orbital energy in Ga, the d -level in the In atom lies closer to the VBM, which enhances the p - d coupling. Moreover, the octahedral environment of the cations in the bixbyite structure makes the d -state shallower. By contrast, the p - d coupling in Ga_2O_3 is weak, and Al_2O_3 has no d orbitals, so that $\Delta E_g^{OF} = 0.0$ in these systems. These results yield a prescription for tuning the optical band gap in a TCO: substitution of atoms with shallower d -states for a fraction of the constituents of the crystal structure tends to enhance the p - d coupling and hence the transparency. Our

insight provides a guideline for designing new TCO's with transparency-to-conductivity ratios comparable to that of ITO.

Keywords: Forbidden optical transition. Indium oxide. Tuning optical band gap.

Referências:

1 WALSH, A. et al. Nature of the band gap of In_2O_3 revealed by first-principles calculations and X-ray spectroscopy. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 16, p. 167402, 2008. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.167402>.

PG164

Simulações computacionais na proteína TM1030 da bactéria hipertermófila *Thermotoga marítima*

SALCEDO, D. L. P¹; HORJALES REBOREDO, E¹

palomino@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A *Thermotoga marítima* (Tm) é uma bactéria que vive numa temperatura entre 55 e 90°C, com temperatura ótima em 80°C. (1) A proteína TM1030 de Tm é um regulador transcricional da família TetR (Tetracycline repressor protein), família reguladora da expressão gênica das proteínas TetA e TetB (Tetracycline resistance protein). (2) Neste trabalho foram executados 200ns de trajetória de dinâmica molecular a três temperaturas (293, 323 e 353K) da proteína TM1030 (PDB-1Z77) usando o pacote GROMACS com o potencial Amber99 e solvente explícito, numa caixa cúbica com 90 Å de comprimento, observando que o RMSD da estrutura média da trajetória é menor em relação à estrutura cristalográfica. Além disso, foi observado que num primer momento esse RMSD tem uma mudança grande e que se estabiliza com uma maior velocidade nas maiores temperaturas. Também foi realizado uma análise de modos normais na mesma estrutura empregando o mesmo potencial, mas com solvente implícito, usando o modelo GBSA, minimizando a estrutura até ter um coeficiente de força média de $6,4 \times 10^{-8} \text{ J mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ que assegura um bom mínimo local. Das trajetórias simuladas a partir das 6 menores frequências foi encontrada uma relação com os movimentos observados nas dinâmicas moleculares e os esperados na transição alostérica entre as estruturas cristalográficas 1Z77, considerada como a ativa, e a 1ZKG, considerada como a inativa. Finalmente, foram calculados os fatores de temperatura das três trajetórias de dinâmica molecular, observando que estes aumentam com o aumento da temperatura, contrario do esperado da cristalografia onde diminuem com o aumento da temperatura do sistema. (3)

Palavras-chave: Dinâmica molecular. Análise de modos normais. Fatores de temperatura B.

Referências:

- 1 HUBER, R. et al.. *Thermotoga marítima* sp. nov. represents a new genus of unique extremely thermophilic eubacteria growing up to 90°C. **Archives of Microbiology**, v. 144, n. 4, p. 324-333, 1986.
- 2 NELSON, K. et al. . Evidence for lateral gene transfer between Archaea and bacteria from genome sequence of *Thermotoga marítima*. **Nature**, v. 399, n. 6734, p. 323-329, 1999.
- 3 KOCLEGA, K. et al. . 'Hot' macromolecular crystals. **Crystal Growth & Design**, v. 10, n. 2, p. 580-586, 2009.

PG165

Characterization of odorant-binding proteins of *Rhodnius prolixus*

SAMPAIO, R. P.¹; THIEMANN, O. H.¹

renataportosampaio@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Chagas diseases, dengue and leishmaniasis are some neglected tropical diseases that effect public health throughout Latin America. Transmitted by blood-feeding insects as mosquitoes, triatomine bugs and sandflies, the prevention of those diseases can be made by the vector control. Studying the sensory biology of these insects is a way to develop strategies to manipulate their behavior. (1) Many odorant molecules recognized by the hematophagous insects olfactory system are already identified. However, the processing of olfactory information is not completely understood. (1) The proteins that are known to be involved in processing of olfactory include odorant-binding proteins (OBPs), odorant receptors, and odorant-degrading enzymes. (2) The OBPs are the first point in the olfactory system and are essential in the reception of odorants, such as pheromones and host chemicals. These odorant-binding proteins are small (15-17 kDa) water-soluble extracellular proteins found in the sensillum lymph of insect antennae sensilla. They are responsible for transport the hydrophobic odorants through the aqueous lymph to receptors in the chemosensory neurons. (2) The detection of this chemical *stimuli* (3) compel the activity of insects including host- seeking, ovi-position, and sugar-feeding. (2) Therefore, those stimulus can regulate survival and reproduction of vectors, preventing the spread of a disease. According to the World Health Organization, the vector control remained the most effective method of preventing transmission of *Trypanosoma cruzi* in Latin America. For that reason, we aim to study and comprehend the OBPs of the vector *Rhodnius prolixus*. In this study, we pretend to clone and characterized four putative OBPs genes of *Rhodnius prolixus*, an important Chagas vector in Brazil. An additional objective is to study OBPs for biotechnological applications. Odorant-binding proteins are capable to ligate broad range of small volatile organic compound in a micro molar magnitude. (3) A desirable characteristic for biosensors and affinity columns, for example. Other interesting features for biotechnological applications are the stability in organic solvents, temperature changes and proteolytic digestion. OBPs could personify a robust, low price, and versatile tools as biosensors or scavengers, or even as reservoirs for slow release of odorants in the environment. OBPs can be expressed both in eukaryote and bacterial systems and are easily purified. With good yield and low cost, relatively large amounts can be achieved for use in biotechnological applications. (3) The resultant information of this study gathered with available acknowledge about OBPs structures and affinities to different molecules should permit the design of mutants OBPs for different applications. (3) Qualifying OBPs as a promising tool in research.

Keywords: *Rhodnius prolixus*. Odorant binding protein. Biotechnological application.

Referências:

1 GUIDOBALDI, F.; MAY-CONCHA, I. J.; GUERENSTEIN, P. G. Morphology and physiology of the

olfactory system of blood-feeding insects. **Journal of Physiology - Paris**, v. 108, n. 2-3, p. 96-111, 2014.

2 SENGUL, M. S.; TU, Z. Identification and characterization of odorant-binding protein 1 gene from the asian malaria mosquito, *Anopheles stephensi*. **Insect Molecular Biology**, v. 19, n. 1, p. 49-60, 2010.

3 PELOSI, P. et al. Structure and biotechnological applications of odorant-binding proteins. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 98, n. 1, p. 61-70, 2014.

PG166

EPR study of the oxyborate $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$

SANTANA, V. T.¹; WALMSLEY, L.²; FERNANDES, J. C.³; CONTINENTINO, M. A.⁴; NASCIMENTO, O. R.¹

vstadeu@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Geociências e Ciências Exatas - Departamento de Física - UNESP

³Instituto de Física - UFF

⁴Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF

The mixed valence oxyborate $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$ is a homometallic ludwigite with a one-dimensional substructure known as a three-leg-ladder (3LL) in which three iron sites linearly distributed in the *ab* plane are repeated infinitely along the *c* axis. A charge ordering transition takes place at 280 K along the legs, which also order antiferromagnetically both along the legs and the *c* axis at 110 K. (1,2) We present X-band (9.5 GHz) continuous wave electron paramagnetic resonance (EPR) measurements in single crystal samples of $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$. The data was collected for the temperature range of 4 K - 300 K with the magnetic field oriented perpendicular to the *c* axis. In addition, EPR spectra were obtained for an angular variation of the sample in relation to the applied static magnetic field in three perpendicular planes at room temperature and at 4 K. Adjustments of the data to pseudo-voigtian line shapes show slight variations of the line parameters at the typical transition temperatures pointed out by other techniques. Absence of angular variation and non-saturation behavior of the spectra either at high or low temperatures evidence a delocalized state that persists even at the lower measured temperature. This is in accordance to electronic specific heat and resistivity data, but the origin of this phenomenon remains unclear. We claim that the EPR spectrum is not related to any individual iron center but to a collective mode in the 3LL.

Palavras-chave: Electron paramagnetic resonance. Magnetic properties. Mixed valence oxides.

Referências:

1 GUIMARÃES, R. B.; MIR, M.; CONTINENTINO, M. A.; FERNANDES, J. C.; FONTES, M.B.; YUGUE, E. S.; BAGGIO-SAITOVITCH, E.; MOREIRA, A. M.; SPEZIALI, N. L. Current-voltage and X-ray measurements in $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 226, n. 2002, p. 1983-1984, 2001.

2 GUIMARÃES, R. B.; MIR, M.; FERNANDES, J. C.; CONTINENTINO, M. A.; BORGES, H. A.; CERNICCHIARO, G.; FONTES, M. B.; CANDELA, D. R. S.; BAGGIO-SAITOVITCH, E. Cation-mediated interaction and weak ferromagnetism in $\text{Fe}_3\text{O}_2\text{BO}_3$. **Physical Review B**, v. 60, n. 9, p. 6617-6622, 1999.

PG167**Nano graphene for photothermal therapy**SANTOS, F. A. dos¹; BATISTA, C. B.¹; PAINO, I. M. M.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

fabricioaps@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Graphene and its derivatives represent a new class of two-dimensional nanostructure with the thickness of a carbon atom in a hexagonal lattice. (1) Their unique properties have attracted great attention in biological and biomedical applications, being used as diagnostic and therapeutic agents in cancer and other diseases. One of the most important properties of graphenes is the strong optical absorbance in the near infrared and subsequently conversion of radiation into heat. This property can be used in hyperthermia to induce thermally-activated cell death in solid tumors, allowing a lower inflammatory response and side effects compared to traditional chemotherapy and radiotherapy. This methodology may be the key for future personalized cancer treatment. Here we report the exfoliation of expandable Graphite to obtain large area Graphene Oxide (GO) flakes. The GO flakes were then broken into nanosheets using the ultrasonic tip. Next, GO was reduced using Ammonium Hydroxide NH_4OH in the presence L-Glutamine. Photothermal therapy was applied after incubation of Hela cell (10^5 cells) and further exposition to an infrared laser in 808 nm with 0.6Wcm^{-2} power. Our results demonstrate that the GO flakes did not induce significant cytotoxic response in lower concentrations. Moreover, 25 mgL^{-1} it was sufficient for cell death after laser shining. Flow cytometry revealed that the main mechanism of cell death was apoptosis. Samples exhibited an increase of $9\text{ }^\circ\text{C}$. Our findings make it possible to use modified GO to cancer treatment. Additional research is necessary to determination of the risks associated with the use of graphene *in vivo*, and to understand in more detail the interaction of this nanomaterial in biological media.

Keywords: Nanographene. Photothermal. Cancer.**Referências:**

1 GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S.. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, n. 3, p. 183-191, 2007. doi: 10.1038/nmat1849.

PG168

Estudo das relações quantitativas entre estrutura e atividade de uma série de inibidores azóis de *Plasmodium falciparum*

SANTOS, J. dos¹; GUIDO, R. V. C.¹

jessicadsanti@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Com mais de 200 milhões de infecções a cada ano, a malária pode ser considerada consequência de subdesenvolvimento social, descrevendo situações endêmicas em muitos países pobres. Em 2013, foram estimadas aproximadamente 600 mil mortes decorrentes da malária, com alta porcentagem ocorrendo em crianças menores de 5 anos. (1) A malária é uma doença infecciosa causada por parasitas do gênero *Plasmodium*, transmitido através da picada de fêmeas do mosquito *Anopheles* spp. O *Plasmodium falciparum* é o mais agressivo e letal para os humanos. Formas de resistência parasitária têm surgido rapidamente, sendo de extrema importância a seleção de novos alvos moleculares e o planejamento de agentes antimaláricos inovadores. Estudos sugerem que séries de compostos heterocíclicos derivados de azóis são promissores candidatos a fármacos com atividade antimalárica, tanto em linhagens sensíveis como em resistentes, além de apresentarem baixa citotoxicidade. (2-3) O presente estudo tem como objetivo identificar as bases moleculares responsáveis pela atividade antimalárica de uma série de derivados azol. Um conjunto de dados contendo 70 derivados de azol foi organizado e estudos das relações quantitativas entre a estrutura e atividade (QSAR, do inglês *quantitative structure-activity relationship*), bi- (2D) e tridimensionais (3D), foram conduzidos. Modelos robustos e preditivos foram construídos com os métodos de holograma QSAR (HQSAR) ($q^2 = 0,63$, $r^2 = 0,94$ para o conjunto ImiDio; e $q^2 = 0,79$, $r^2 = 0,97$ para o conjunto ImiTri), análise comparativa dos campos moleculares (CoMFA, do inglês *comparative molecular field analysis*) ($q^2 = 0,64$, $r^2 = 0,92$ para o conjunto ImiDio; e $q^2 = 0,72$, $r^2 = 0,94$ para o conjunto ImiTri) e a análise comparativa dos índices de similaridade (CoMSIA, do inglês *comparative molecular similarity indices analysis*) ($q^2 = 0,54$, $r^2 = 0,76$ para o conjunto ImiDio; e $q^2 = 0,68$, $r^2 = 0,95$ para o conjunto ImiTri). A validação externa dos modelos indicou que estes apresentam consistência interna e parâmetros de qualidade estatística com elevada capacidade preditiva ($r^2_{pred} = 0,59$ e $0,88$, para modelos do conjunto ImiDio e ImiTri, respectivamente). A análise integrada dos modelos HQSAR, CoMFA e CoMSIA sugere que a presença de anéis imidazol e triazol são favoráveis para a atividade inibitória dessa classe de compostos. A informação obtida dos modelos de QSAR 2D e 3D combinada com futura síntese orgânica podem contribuir para o desenvolvimento de novos inibidores que possuam alta afinidade e seletividade para o tratamento da malária.

Palavras-chave: QSAR. *Plasmodium falciparum*. Inibidor.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **World health statistics 2014: a wealth of information on global public health**. Geneva: WHO, 2014. 12 p.

2 VLAHAKIS, J. Z. et al.. Anti-*Plasmodium* activity of imidazolium and triazolium salts.. **Bioorganic & Medicinal Chemistry**, v. 18, n. 16, p. 6184-6196, 2010. doi: 10.1016/j.bmc.2010.05.020.

3 WITSCHHEL, M. C. et al.. Inhibitors of plasmodial serine hydroxymethyltransferase (SHMT): cocrystal structures of pyrazolopyrans with potent blood- and liver-stage activities. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 58, n. 7, p. 3117-3130, 2015. doi: 10.1021/jm501987h.

PG169

Máquinas quânticas térmicas e magnéticas

SANTOS, M. L.¹; SOARE-PINTO, D. O.¹

millenalogrado@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Termodinâmica foi concebida através da observação da eficiência no funcionamento mecânico de máquinas que dependiam da troca de temperatura e calor com meio. O paradigma de modelo nesses estudos foram máquinas idealizadas que operavam em ciclos tais como o ciclo de Carnot (o mais eficiente possível) e o ciclo de Otto. Esses ciclos de operação das máquinas ditas térmicas podem ser decompostos em trechos em que processos termodinâmicos, tais como adiabático e isotérmico, atuam. Contudo, embora a compreensão da eficiência no funcionamento dessas máquinas tenha sido o primeiro passo, esta teoria não ficou limitada a tal, se desenvolvendo ao ponto de ser considerada um dos pilares da Física moderna. Atualmente tem-se visto um crescimento substancial dos estudos da Termodinâmica considerando sistemas pequenos e/ou fora do equilíbrio termodinâmico. Resultados curiosos têm sido obtidos quando considerados sistemas pequenos tais que efeitos quânticos têm grande relevância. (1) Nesta situação surge o que tem sido chamado de Termodinâmica quântica: as leis da Termodinâmica sendo obtidas a partir de flutuações descritas pela Mecânica Quântica. (2) Naturalmente, um dos primeiros problemas a ser tratado nesta nova circunstância foi a eficiência de máquinas térmicas. Para a descrição dessas máquinas quânticas foi primeiro construído o que seriam os diferentes processos termodinâmicos que guiam o funcionamento da mesma. Baseado nesses resultados, as versões quânticas dos ciclos de Carnot e Otto, através dos quais essas máquinas operavam, foram também determinados e as propriedades das máquinas térmicas puderam ser exploradas e comparadas com seu análogo clássico. (3) Nesta dissertação estudaremos diferentes tipos de máquinas térmicas operando no ciclo de Otto. Essas máquinas são descritas por Hamiltonianos de dois spins $1/2$ que apresentam interação. Algumas características desses Hamiltonianos são exploradas e o papel das mesmas sobre a eficiência da máquina foram determinado. Comparamos também esta eficiência com os limites dados pelo ciclo de Carnot e o limite dado pela situação em que o acoplamento entre os spins é nulo. Diferentes situações físicas são exploradas e suas consequências determinadas. Por fim, proporemos algumas discussões sobre o papel da Mecânica Quântica no funcionamento destas máquinas.

Palavras-chave: Termodinâmica quântica. Ciclo de Otto. Máquinas térmicas.

Referências:

- 1 QUAN, H. T. et al. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. II. **Physical Review E**, v. 79, n. 4, p. 041129-1-041129-10, 2009. doi: 10.1103/PhysRevE.79.041129.
- 2 QUAN, H. T. et al. Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. **Physical Review E**, v. 76, n. 3, p. 031105-1-031105-18, 2007. doi: 10.1103/PhysRevE.76.031105.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

3 QUAN, H. T.; ZHANG, P.; SUN, C. P. Quantum heat engine with multilevel quantum systems. **Physical Review E**, v. 72, n. 5, p. 056110-1-056110-10, 2005. doi: 10.1103/PhysRevE.72.056110.

PG170

Síntese e aplicação de lipossomos plasmônicos multifuncionais na nanomedicina

SANTOS, O. A.¹; BERNARDI, J. C.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

olavo.a.santos@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Devido às propriedades únicas exibidas por nanomateriais, diagnósticos e tratamentos por meio de diferentes estratégias vêm sendo desenvolvidos, demonstrando grande potencial para combate de doenças, tais como o câncer. (1) Atualmente, sistemas híbridos de lipossomos com outros nanomateriais tem ganhado destaque por eficiência em associar a versatilidade de encapsulamento dos lipossomos com características e eletrônicas únicas das nanopartículas. (2) Atenção especial tem sido dada à associação dos com ouro, denominados lipossomos plasmônicos, devido à banda de absorção plasmônica do metal, que pode ser sintonizado para absorção na região do infravermelho-próximo, região em que os tecidos e água possuem mínima absorção, sendo adequado para a utilização em liberação controlada de fármacos e a utilização em fototerapia. (2,3) A possibilidade de combinar o carregamento de fotossensibilizadores e fármacos pelos lipossomos com as propriedades plasmônicas do ouro tem permitido a obtenção de sistema que capazes de efetuar terapias combinadas, como a terapia fototérmica, a terapia fotodinâmica e quimioterapia, com um único estímulo. (2) Diante da relevância desse tema, o presente projeto visa o desenvolvimento de sistemas constituídos de lipossomos plasmônicos multifuncionais capazes de efetuar, simultaneamente, procedimentos terapêuticos, como terapia fotodinâmica, terapia fototérmica e quimioterapia.

Palavras-chave: Lipossomo plasmônico. Terapia fotodinâmica. Fototerapia.

Referências:

- 1 BARDHAN, R. et al. Theranostic nanoshells: from probe design to imaging and treatment of cancer. **Accounts of Chemical Research**, v. 44, n. 10, p. 936-946, 2011. doi: 10.1021/ar200023x.
- 2 AL-JAMAL, W. T.; KOSTARELOS, K. Liposome-nanoparticle hybrids for multimodal diagnostic and therapeutic applications. **Nanomedicine**, v. 2, n. 1, p. 85-98, 2007. doi: 10.2217/17435889.2.1.85.
- 3 OH, J.; YOON, H.-J.; PARK, J.-H. Plasmonic liposomes for synergistic photodynamic and photothermal therapy. **Journal of Materials Chemistry B**, v. 2, n. 17, p. 2592-2597, 2014. doi: 10.1039/C3TB21452D.

PG171

Characterization of components of the biosynthesis and insertion pathways of selenocysteine in *Naegleria gruberi*: selenophosphate synthetase and tRNA^{Sec}

SANTOS, T. M.¹; THIEMMAN, O. H.¹

thomas.ms@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The twenty-first amino acid, selenocysteine (Sec), represents the main available organic form of selenium, an essential micronutrient, and has distinct synthesis pathways for bacteria, archaea and eukaryotes, (1) justifying studies evaluating its particular evolutionary consequence and potential practical use. *Naegleria gruberi*, the organism studied in this project, as a basal eukaryote presents itself as quite an interesting target for understanding the process of synthesis and incorporation of the amino acid in the eukaryotic domain of life. Recently, a gene encoding for the protein Selenophosphate synthetase (SPS) been identified in *N. gruberi* (2), a protein with a central role in the pathway, involved in the catalysis of the conversion of selenide and adenosine 5'-triphosphate (ATP) in selenophosphate, an organic form of selenium. The *N. gruberi*'s SPS contains two distinct domains: the C-terminal domain, which has high sequence identity with bacterial SPSs and the N-terminal domain, similar to prokaryotic methyltransferases. Furthermore, another gene identified in the protozoan is analogous to the SelC prokaryotic gene, responsible for the expression of tRNA^{Sec}. This specific transfer RNA promotes the insertion of selenocysteine into selenoproteins in the UGA codon, which is, most often, interpreted as a stop codon during mRNA translation. In addition to this, bioinformatical data indicate the existence of yet another tRNA translating the UGA codon, suggesting two possible hypotheses: it could either be an additional tRNA^{Sec} for incorporation of Sec or a tRNA that carries another amino acid, hitherto unknown, with the ability to recognize the same codon. The present project intends to study one of the domains of the SPS enzyme, the one which has a high sequence identity with prokaryotic methyltransferases, regarding its atomic structure and physiological role in addition to performing experiments allowing the elucidation of the role of the newly identified tRNA. For the SPS domain, the protein has already been heterologously expressed in *E. Coli*, but has been showing some difficulties in remaining soluble after the extraction process. Alternative lysis, extraction and clarification procedures are being tested. Obtaining a soluble protein will enable the following experiments, consisting of immunochemical assays and biophysical characterizations, in addition to the tracking of structural aspects of the proteic domain through crystallographic studies. For the tRNA, the isolation and purification of the two possible tRNA^{Sec} candidates is in progress. Molecular biology techniques and biochemical assays that allow investigating their function and defining its involvement in the translation of selenoproteins process will be applied. Together, these experiments may contribute to the understanding of the biosynthesis of selenocysteine in eukaryotes.

Keywords: *Naegleria gruberi*. Selenocysteine. tRNA^{Sec}.

Referências:

1 STADTMAN, T. C. Selenocysteine. **Annual Review of Biochemistry**, v. 65, p. 83-100, 1996. doi: 10.1146/annurev.bi.65.070196.000503.

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

PG172

Processamento e análise de imagens para microscopia confocal

SBRISSA NETO, D. A.¹; TRAVIESO, G.¹

sbrissa@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O melanoma cutâneo é um grave problema de saúde pública a nível mundial. De acordo com o Instituto Nacional do Câncer (INCA), a incidência de câncer de pele no Brasil tem aumentado ano após ano e consequentemente elevado o índice de mortes por melanoma. O diagnóstico precoce do tumor e sua excisão são fundamentais para um melhor prognóstico de cura dos pacientes. A partir da década de 80, a dermatoscopia clínica ganhou grande importância, aumentando de maneira significativa a acurácia do diagnóstico do melanoma em estágios iniciais. Porém, mesmo com a ampliação proporcionada pelos dermatoscópios, existem alguns tipos de lesões benignas que apresentam quadro dermatoscópico duvidoso, levando a realização de cirurgias desnecessárias. Levando-se em conta que o número de casos suspeitos que passam pelos ambulatorios é elevado e a quantidade de especialistas geralmente é insuficiente para a demanda, cada vez mais tem-se buscado métodos de diagnóstico mais eficientes e precisos, a fim de possibilitar que casos críticos sejam identificados e tratados a tempo. Mais recentemente, o microscopia confocal tem despontado como um método de diagnósticos auxiliar bastante promissor, por ser um exame não invasivo, realizado *in vivo*, de forma simples, indolor e de rápida execução. Sua grande vantagem é a possibilidade de identificar estruturas aos níveis celulares e examinar as camadas da pele com resolução semelhante à da histopatologia. (1, 3) Neste viés, o uso da computação da análise de imagens de microscopia confocal vem ganhando cada vez mais força, como uma possível ferramenta de auxílio aos especialistas nas triagens de manchas suspeitas na pele. (2) Há possibilidades, por exemplo, de identificar estruturas características de cada tipo de lesão, tornando o diagnóstico ainda mais confiável. Além disso, pode-se obter uma visualização tridimensional da lesão através da organização das imagens microscópicas obtidas. A visualização tridimensional pode fornecer características tão confiáveis quanto um exame histopatológico. O presente projeto tem como objetivos o estudo, identificação e elaboração de ferramentas computacionais eficientes para a análise e tratamento de imagens de microscopia confocal.

Palavras-chave: Diagnóstico Precoce do Melanoma. Processamento de Imagens. Microscopia confocal.

Referências:

1 HOFMANN-WELLENHOF, R.; PELLACANI, G.; MALVEHY, J.; SOYER, H. P. **Reflectance confocal microscopy for skin diseases**. New York: Springer Science & Business Media, 2012. 500 p.

2 CHEN, G.; LUI, H.; ZENG, H. Image segmentation for integrated multiphoton microscopy and reflectance confocal microscopy imaging of human skin in vivo. **Quantitative Imaging in Medicine and Surgery**, v. 5, n. 1, p. 17 - 22, 2015.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

3 HOFMANN-WELLENHOF, R. et al. Reflectance confocal microscopy: state-of-art and research overview. **Seminars in Cutaneous Medicine and Surgery**, v. 28, n. 3, p. 172 - 179, 2009.

PG173

Dinâmica de operadores tensoriais em cadeias quânticas de spin

SCHOSSLER, M. O.¹; PEREIRA, R. G.¹

matheus.schossler@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um tema de grande interesse em física da matéria condensada são as propriedades dinâmicas em sistemas quânticos de muitos corpos. Essas propriedades nos informam sobre a propagação de excitações elementares e sobre mecanismos de relaxação em sistemas interagentes. Neste contexto as funções de correlação tem sido de grande relevância devido aos experimentos que medem a dependência temporal. Pode-se observar a evolução de sistemas de átomos frios e íons armadilhados para tempos relativamente longos. Neste trabalho procura-se estudar métodos exatos para determinar essas funções de correlação. Para tanto usaremos o modelo XY, pois a partir da transformação de Jordan-Wigner a cadeia unidimensional de spins nesse modelo pode ser mapeada em um sistema de férmions livres sem spin, permitindo assim calcular a relação de dispersão de forma simples. (1) Essa transformação pode ser utilizada para o cálculo direto da função de correlação do operador S_j^z , uma vez que essa componente do spin é mapeada numa função da densidade local de férmions no sítio j na representação fermiônica. Também é possível obter a dinâmica para os operadores transversais $S^\pm$, mas estes ficam dependentes dos operadores strings, que são não locais. Para contornar este problema calcula-se essas funções de correlação mapeando-as nos determinantes de Fredholm. (2) O objetivo deste projeto é a análise das funções de correlação de dois spins devido ao operador $T_{ij}^{ab} = S_i^a S_j^b$, onde a, b são as componentes dos spins e i, j são os sítios. Esses operadores tensoriais são interessantes pois estão relacionados a relaxação de sistemas não-integráveis. Até o momento estudamos a função de Green de férmions livres, que descreve a propagação de uma perturbação linear nesses sistemas. Esse propagador possui algumas propriedades importantes; no regime de tempos longos comporta-se como $e^{it}/t^{\frac{1}{2}}$ e também possui seus máximos sobre o "cone de luz". O mesmo tipo de comportamento devemos encontrar para a correlação dos operadores T_{ij}^{ab} , onde a lei de potência e a frequência deve ser diferente para cada escolha das componentes a, b . (3)

Palavras-chave: Cadeias de spin. Dinâmica quântica. Modelos exatamente solúveis.

Referências:

- 1 GIAMARCHI, T. **Quantum physics in one dimension**. New York: Oxford University Press, 2010. 424 p.
- 2 ZVONAREV, M. B.; CHEIANOV, V. V.; GIAMARCHI, T. The time-dependent correlation function of the Jordan-Wigner operator as a Fredholm determinant. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2009, p. P07035-1-P07035-10, 2009. doi: 10.1088/1742-5468/2009/07/P07035.
- 3 PEREIRA, R. G.; WHITE, S. R.; AFFLECK, I. Exact edge singularities and dynamical correlations in



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

spin-1/2 chains. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 2, p. 027206-1-027206-4, 2008.

PG174

Caracterização das interações macromoleculares entre proteínas da via de síntese de selenocisteínas

SCORTECCI, J. F.¹; SERRÃO, V. H. B.¹; FERNANDES, A. F.¹; BASSO, L. G. M.²; THIEMANN, O. H.¹

jessica.scortecchi@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

A existência de uma maior variedade de aminoácidos codificados tem estimulado estudos sobre os mecanismos de síntese, reconhecimento e incorporação desses resíduos nas cadeias polipeptídicas nascentes. Como exemplo, pode-se destacar a via específica de incorporação do aminoácido selenocisteína, um evento co-traducional dirigido pelo códon UGA. Em bactérias, essa via é formada por uma complexa maquinaria molecular composta pelos elementos Selenocisteína Sintase (SelA), Fator de Elongação Específico (SelB), Selenofosfato Sintetase (SelD), tRNA específico (SelC ou tRNA^{Sec}), sequência específica no mRNA (Sequência de Inserção de Selenocisteínas - SecIS) e Seril-tRNA Sintetase (SerRS) (1), além de outras enzimas que suprem essa via com substratos fundamentais para a biossíntese de selenocisteínas, como a Selenocisteína Liase (CsdB). (2) Pelo fato do selênio ter uma elevada toxicidade no ambiente celular, é fundamental a compreensão do mecanismo catalítico e de elementos essenciais na formação dos complexos da via na etapa de incorporação junto ao tRNA^{Sec}. A interação entre CsdB e SelD foi proposta em 2008 (3), no entanto, nunca verificada experimentalmente. No presente trabalho, realizou-se a clonagem, expressão e purificação da enzima CsdB envolvida nessa interação específica. A caracterização das enzimas SelD e CsdB foi realizada através de medidas de fluorescência intrínseca (IFS), espalhamento de luz dinâmico (DLS), dicroísmo circular (CD) e calorimetria diferencial de varredura (DSC) e assim, verificou-se a presença de dímeros em solução bem como o valores diferentes da temperatura de *melting* (T_m) para cada amostra. A interação entre essas enzimas foi caracterizada através de técnicas como calorimetria de titulação isotérmica (ITC) e espectroscopia de anisotropia de fluorescência (FAS), indicando uma constante de (130.4 ± 4.5) nM. A formação do complexo foi confirmada através de DSC observando o deslocamento dos picos de desnaturação em comparação com o resultado para cada proteína isoladamente. Tentativas de caracterização estrutural utilizando técnicas como espalhamento de raios-X a baixos ângulos (SAXS) e ensaios de cristalização foram realizados. A interação SelD.CsdB deve ocorrer de modo que formas tóxicas contendo selênio não sejam encontradas livres no ambiente celular. Ademais, foram realizado modelos estruturais do complexo interagente SelD.CsdB afim de ajudar a compreensão dos mecanismos de reconhecimento e entrega de compostos contendo selênio. Este trabalho é o primeiro estudo que verifica experimentalmente a interação entre CsdB e SelD e busca identificar e propor modelos de interação entre proteínas envolvidas em metabolismo de elementos tóxicos e nocivos à célula.

Palavras-chave: Selenocisteína. Caracterização biofísica. Interação proteína-proteína.

Referências:

- 1 TURANOV, A. A.; XU, X. M.; CARLSON, B. A.; YOO, M. H.; GLADYSHEV, V. N.; HATFIELD, D. L. Biosynthesis of selenocysteine, the 21st amino acid in the genetic code, and a novel pathway for cysteine biosynthesis. **Advances in Nutrition**, v. 2, n. 2, p. 122-128, 2011.
- 2 HATFIELD, D. L.; BERRY, M. J.; GLADYSHEV, V. **Selenium**: its molecular biology and role in human health. New York: Springer, 2012. 598 p.
- 3 ITOH, Y. et al. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium Incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**, v. 385, n. 5, p. 1456-1469, 2009.

PG175

Magnetometria com centro de vacâncias de nitrogênio em diamante

SEGURA, C. O.¹; SOARES-PINTO, D. O.¹; AZEVÊDO, E. R.¹; MUNIZ, S. R.¹; FILGUEIRAS, J. G.¹; GUIMARÃES, F. G.¹

charlieoncebay@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Existem muitas técnicas para medir campos magnéticos com precisão em áreas como a medicina, geologia, materiais, etc., estas técnicas requerem uma ampla gama de especificações como sensibilidade, resolução espacial, largura da banda, escalabilidade e temperatura. (1) Nesse contexto os centros de vacância de nitrogênio (NV) trouxe muita atenção pois, mesmo à temperatura ambiente, o spin do elétron do centro NV é o suficientemente estável para ser manipulado de forma coerente e com alta fidelidade. Além disso, o spin do elétron pode ser preparado e lido por meios ópticos simples. O centro NV é um sistema quântico intrinsecamente híbrido: o spin de seu elétron é sempre acoplado ao spin nuclear de seu próprio átomo de nitrogênio. (2) Nosso trabalho tem como objetivo a obtenção e caracterização dos centros NVs em diamante, observando suas propriedades ópticas e espectroscópicas para otimizar seu uso em magnetometria. Além disso, se desenhará e construirá o equipamento para caracterização e manipulação de estados quânticos desses sistemas. Por fim, usando as informações obtidas e as que se encontram na literatura (3) elaboraremos um plano para explorar esses sistemas como sensores de fenômenos magnéticos em micro e nano escala.

Palavras-chave: Magnetometria. Microscopia confocal. Centros de vacância de nitrogênio.

Referências:

- 1 MAZE, J. R; STANWIX, P. L.; HODGES, J. S.; HONG, S.; TAYLOR, J. M.; CAPPELLARO, P.; JIANG, L; GURUDEV DUTT, M. V.; TOGAN, A.; ZIBROV, A. S.; LUKIN, M. D. Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond. **Nature**, v. 455, p. 644-647, 2008. doi: 10.1038/nature07279.
- 2 DOHERTY, M. W.; MANSON, N. B.; DELANEY, P; JELEZKO, F.; WRACHTRUP, J.; HOLLENBERG, L. The nitrogen-vacancy colour centre in diamond. **Journal Physics Reports**, v. 528, n. 1, p. 1-45, 2013. doi: 10.1016/j.physrep.2013.02.001.
- 3 LEDBETTER, M. P.; CRAWFORD, C. W.; PINES, A.; WEMMER, D. E.; KNAPPE, S.; KITCHING, J; BUDKER, D. Optical detection of NMR J-spectra at zero magnetic field. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 199, n. 1, p. 25-29, 2009. doi: 10.1016/j.jmr.2009.03.008.

PG176

Avaliação da Terapia Fotodinâmica em cultura celular tridimensional por levitação magnética.

SEKIMOTO, L. S. A.¹; PIRES, L.¹; SABINO, L. G.¹; PRATAVIEIRA, S.¹; KURACHI, C.¹

larissa.sekimoto@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A Terapia Fotodinâmica surgiu como uma modalidade terapêutica promissora, devido ao seu papel como tratamento para neoplasias e outras doenças de pele. Ela é baseada no acúmulo seletivo de um fotossensibilizador no tecido tumoral, seguido pela iluminação com fonte de luz de um comprimento de onda apropriado, ocasionando na morte do tumor. (1) Embora a cultura celular convencional em monocamada tenha sido uma ferramenta essencial para a biologia moderna, uma vez que permite avaliar o comportamento das células fora do organismo, ela recria inadequadamente o ambiente natural no qual as células residem. Essa limitação tem levado a pesquisas em cultivo celular tridimensional *in vitro*, como o método de levitação magnética (MLM). No MLM, nanopartículas ferromagnéticas são ligadas à membrana de células em cultura em monocamada para torná-las magnéticas. (2) Quando suspensas em meio de cultura, é possível a utilização de um campo magnético externo, assim as células levitam na interface ar-líquido, formando matriz extracelular e agregando-se para formar cultura tridimensional ou um tecido *in vitro*. (3) Dessa forma, esse estudo busca avaliar a eficácia da Terapia Fotodinâmica em modelo de tumor de melanoma humano, usando levitação magnética, para observar a resposta fotodinâmica em função da profundidade e também se há ocorrência de recrescimento tumoral pós-tratamento. Análises indicaram que o crescimento do tumor de melanoma foi acentuado, atingindo uma estrutura única e densa em quatro dias de levitação e, permanecendo viável mesmo ao longo de doze dias de levitação. Estudos da distribuição dos fotossensibilizadores Photogem e Photodithazine, ambos na concentração de 50 µg/mL por microscopia confocal, demonstraram que o Photodithazine obteve distribuição mais homogênea no tumor, indicando ser o mais adequado para utilização em Terapia Fotodinâmica de melanoma. Além disso, uma vez que os tumores de melanoma foram estabelecidos com 24h de levitação para placas de 96 poços e 48h para 24 poços, houve a realização de Terapia Fotodinâmica com Photodithazine, no intervalo de concentrações de 1 µg/mL a 150 µg/mL, na dose de irradiação de 20 J/cm² com dispositivo à base de LED (biotable) em 660 nm. Resultados do dano da Terapia demonstraram que tumores mais densos em placa de 24 poços, com espessura aproximada de 100 µm, necessitaram de maiores concentrações de Photodithazine, 100 µg/mL e 150 µg/mL, para causar morte tumoral significativa de 20%. Por outro lado, para tumores em placas de 96 poços, com espessura aproximada de 60 µm, concentrações de Photodithazine a partir de 50 µg/mL já ocasionaram em 40% de morte tumoral.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Cultivo tridimensional. Levitação magnética.

Referências:

1 BECKER, J. L.; SOUZA, G. R. Using space-based investigations to inform cancer research on earth. *Nature Reviews Cancer*, v. 13, n. 5, p. 315-327, 2013. doi: 10.1038/nrc3507.

2 HAISLER, W. L.; TIMM, D. M.; GAGE, J. A.; TSENG, H.; KILLIAN, T. C.; SOUZA, G. R. Three-dimensional cell culturing by magnetic levitation. **Nature Protocols**, v. 8, n. 10, p. 1940-1949, 2013. doi: 10.1038/nprot.2013.125.

3 TSENG, H.; BALAOING, L. R.; GRIGORYAN, B.; RAPHAEL, R. M.; KILLIAN, T. C.; SOUZA, G. R.; GRANDE-ALLEN, K. J. A three-dimensional co-culture model of the aortic valve using magnetic levitation. **Acta Biomaterialia**, v. 10, n. 1, p. 173-182, 2014. doi: 10.1016/j.actbio.2013.09.003.

PG177

Two-Component Landau Liquid Model for New State of Matter

SERENONE, W. M.¹; MENDES, T.¹

willian.serenone@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Shortly after its formation, the universe had a high temperature. Quarks and gluons, the building blocks of atomic nucleus, interacted very weakly between them. This hot and dense state of matter is known as quark-gluon plasma and is being studied by several experiments, such as the ALICE and LHCb at CERN and STAR and PHENIX at Brookhaven Lab. The results shows that it behaves like a liquid of very low viscosity, but obeys an equation-of-state very similar to an ideal gas. (1) A model which incorporates both of these properties is the liquid of two components of Landau. In this model, a superfluid liquid is described with two four-vector velocities u^μ and v^ν . The first velocity is assigned a normal density ρ_n and the second is assigned a superfluid density ρ_s . The energy-momentum tensor $T^{\mu\nu}$ of the model depends on the above quantities. (1) On another hand, it is expected that the above mentioned properties of the quark-gluon plasma emerge from Quantum Chromodynamics (QCD), the fundamental theory of interactions involving quarks and gluons. Our work consists in performing a Lattice QCD (LQCD) simulation to compute self-correlations of $T^{\mu\nu}$, which can then be used to verify the Landau liquid model. In a LQCD simulation, we discretize the space in a four-dimensional euclidean lattice and treat the quarks (fermions) as Grassmann variables living in the lattice sites. The gluons (gauge fields) are described by SU(3) group elements living in the links between sites. (2) The high-temperature regime is introduced by compactifying the time direction. (3) To perform a lattice simulation, we use the Feynman path-integral formulation of quantum field theory to compute expected values of operators (such as $T^{\mu\nu}$). The path-integral on the lattice is very similar to a partition function, thus enabling its evaluation through Monte Carlo methods. (2) In such a simulation, we build a Markov chain to generate a few thousands configurations. The expected values of $T^{\mu\nu}$ and self-correlations functions are obtained by evaluating them for each field configuration and then averaging over these values. Of course, there are some technical details to be taken care of. As an example, the signal when "measuring" $T^{\mu\nu}$ naively might be too "noisy". Renormalizing factors need to be found and systematic errors (due to finite-size lattice, for example) need to be estimated. The configurations generated by Monte Carlo methods are correlated, and this should be factored in our statistical error estimations as well. (2)

Keywords: Quark-gluon plasma. Monte Carlo simulations. Quantum chromodynamics.

Referências:

1 CHERNODUB, M. N.; VERSCHELDE, H.; ZAKHAROV, V. Two-component liquid model for the quark-gluon plasma. **Theoretical and Mathematical Physics**, v. 170, p. 211-216, 2012. doi: 10.1007/s11232-012-0023-8.

2 GATTRINGER, C.; LANG, C. **Quantum chromodynamics on the lattice**: an introductory



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

presentation. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2009. 343 p.

3 KANAYA, K. An introduction to finite temperature quantum. **Progress of Theoretical Physics Supplements**, v. 131, p. 73-105, 1998. doi: 10.1143/PTPS.131.73.

PG178

Characterization of macromolecular interactions from *Escherichia coli* selenocysteine pathway

SERRAO, V. H. B.¹; FERNANDES, A. de F.¹; SCORTECCI, J. F.¹; BASSO, L. G. M.²; HEEL, M. van³; PORTUGAL, R. V.⁴; THIEMANN, O. H.¹

vitor.serrao@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

³Netherlands Centre of Electron Nanoscopy (NeCEN) - Universiteit Leiden, Leiden, Netherlands

⁴Brazilian Nanotechnology National Laboratory (LNNano), CNPEM, Campinas, Brazil

The protein translational process has been identified as a central role mechanism in cellular metabolism, in special, the study of non-canonical amino acids like selenocysteine and pyrrolysine that represents a genetic code expansion. Selenocysteine (Sec), the main biological form of selenium, is present in different life domains and is cotranslationally incorporated in selenoproteins using a UGA codon associated with a structural element in mRNA denominated *SecIS* (Sec Incorporation Sequence). (1) In *Bacteria*, this specific incorporation pathway requires a complex machinery where the genes involved are entirely characterized, but the interactions between the encoded proteins in Sec incorporation pathway are not fully known yet. The Sec incorporation pathway starts with the specific tRNA to Sec incorporation (tRNA^{Sec}) charging with L-serine amino acid (Ser) by the Seryl-tRNA Synthetase (SerRS). Then, this Ser-tRNA[Ser]^{Sec} is recognized by Selenocysteine Synthase (SelA), responsible for Ser-Sec conversion, resulting in Sec-tRNA^{Sec}, which is, in turn, incorporated into polypeptide chain in Ribosome after delivery by Specific Elongation Factor (SelB) with GTP consumption and *SecIS*/tRNA^{Sec} recognition. (2-3) In this study, a new purification protocol for SelB was performed to remove the endogenous RNAs and different spectroscopic and calorimetric techniques were used to show the SelB interactions with GTP/GDP nucleotides and specific RNAs. Additionally, interactions assays by fluorescence methodologies showed that the macromolecular complex Ribosome.SelB.GTP.SecIS.tRNA^{Sec} was formed, which was further corroborated by Transmission Electron Microscopy, calorimetric and GTPase activity assays. The binding constants between SelB.GTP.tRNA^{Sec}, SelB.GTP.tRNA^{Sec}.SelA, SelB.GTP.SecIS and SelB.GTP.tRNA^{Sec}.SecIS suggest an event ordering where the SelB.GTP complex would firstly be recognized by the binary complex SelA.tRNA^{Sec} to release this specific tRNA and then, the tRNA^{Sec} would be delivered to Ribosome for Sec incorporation in selenoproteins. Therefore, this study provides new insights in protein-protein and protein-RNA interactions in the Sec incorporation pathway and elucidates the importance of the process of synthesis of new proteins.

Keywords: Selenocysteine. Protein-protein interaction . Protein-RNA interaction .

Referências:

1 TURANOV, A. A. et al. Biosynthesis of selenocysteine, the 21st amino acid in the genetic code, and a novel pathway for cysteine biosynthesis. **Advances in Nutrition**, v. 2, n. 2, p. 122-128, 2011. doi: 10.3945/an.110.000265.

2 FORCHHAMMER, K.; BÖCK, A. Selenocysteine synthase from Escherichia coli: analysis of the reaction sequence. **Journal of Biological Chemistry**, v. 266, n. 10, p. 6324-6328, 1991.

3 FORCHHAMMER, K.; BOESMILLER, K; BÖCK, A. The function of selenocysteine synthase and SELB in the synthesis and incorporation of selenocysteine. **Biochimie**, v. 73, n. 12, p. 1481-1486, 1991.

PG179

Protótipo Dataflow implementado em FPGA

SILVA JUNIOR, J. T.¹; MATIAS, P.¹; RUGGIERO, C. A.¹

jtsjunior@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Desde a década de 60 existe um grande interesse acerca do ganho em desempenho de processamento computacional. Limitações físicas como velocidade da luz e o princípio da incerteza não permitem mais que ganhos significativos sejam obtidos somente com o aumento do *clock* do processador, como tem acontecido nas últimas décadas. O paralelismo é um paradigma muito explorado para esse fim. Diversos sistemas computacionais controlados por dados foram analisados a fim de obter esse paralelismo em nível de organização e arquitetura de computadores. A empresa americana Intel possui em seu catálogo de produtos comerciais um processador com 50 núcleos físicos em um único chip (Xeon Phi, arquitetura MIC), oferecida conjuntamente com uma distribuição Linux específica para tal processador. Talvez um modelo computacional **MIMD** (Múltiplas Instruções, Múltiplos Dados) possa ser uma alternativa mais viável para o controle dessa grande quantidade de processadores, ao invés de deixar a cargo do sistema operacional controlá-los, como vem sendo feito no modelo de **Von Neumann** ainda utilizado nos dias atuais. O Dataflow é uma técnica para sistemas computacionais controlado por dados, para especificar programas no formato de um grafo bidimensional: Instruções que podem ser executadas paralelamente são dispostas lado-a-lado e instruções que devem ser executadas sequencialmente são dispostas uma abaixo da outra. O objetivo desse trabalho é a criação de um protótipo que siga as diretrizes do protótipo Dataflow de Manchester com a utilização de FPGA, um dispositivo destinado para a reconfiguração de hardware a partir do rearranjo de portas lógicas. (1) O Protótipo Dataflow de Manchester é baseado em um sistema dataflow dinâmico, ou seja, é adicionado um rótulo a cada ficha. Esse rótulo permite a realização de laços e recursividade reutilizando o mesmo grafo. (2) Esse protótipo é composto por 5 módulos principais, sendo eles: Fila de Fichas (unidade de buffer), Unidade de Emparelhamento (emparelhamento de fichas destinadas a mesma instrução), Unidade de Sobrecarga (alocação de fichas que aguardam emparelhamento), Unidade de Instruções (armazenamento do código do programa em execução) e Unidade de Processamento (armazena as unidades funcionais que compõe o processador). (3) O presente projeto tem por objetivo a implementação desse protótipo para analisar seu desempenho e viabilidade a partir de dispositivos modernos. Foram desenvolvidas 4 das 5 unidades mencionadas, tendo sido removida a Unidade de Sobrecarga, que não se fez necessária para a execução de programas mais simples. Inicialmente a implementação foi feita exatamente de acordo com as diretrizes do protótipo original; porém o desempenho das Unidades Funcionais (em formato de *pipeline*), tornava o caminho crítico do restante da máquina um gargalo para a exploração de paralelismo, apresentando um *speedup* não ideal. Foi proposto o aumento da largura de banda para a comunicação entre as unidades que compõe a máquina. Isso promoveu considerável aumento no *throughput* de toda a estrutura, apresentando um *speedup* muito próximo do ideal. Hoje, a máquina possui *speedup* superior a de processadores comerciais modernos, evidenciando a imenso potencial dessa arquitetura que ainda nos dias atuais mostra grande capacidade de desempenho diante de tecnologias modernas.

Palavras-chave: Protótipo. Dataflow. FPGA.

Referências:

- 1 MATIAS, P. et al. Modular acquisition and stimulation system for timestamp-driven neuroscience experiments. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON APPLIED RECONFIGURABLE COMPUTING, 11., 2015, Bochum, Germany. **Proceedings...** Bochum, Germany: ARC, 2015.
- 2 KIRKHAM, C. C. **The Manchester prototype dataflow system**: basic programming manual. 6th ed. Manchester: UMC-DF-BPM, 1987. 39 p.
- 3 GURD, J. R.; KIRKHAM, C. C.; WATSON, I. The Manchester prototype dataflow computer. **Communications of the ACM**, v. 28, n. 1, p. 34-52, 1985.

PG180

Differential geometry method for protein conformational ensemble clustering and analyses; HPV E1-DBD dynamics study as a test case

SILVA NETO, A. M.¹; MONTALVÃO, R. W.¹

amarinho@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The use of NMR-restrained Molecular Dynamics for determination of conformational ensembles of proteins allow the exploration of conformational changes on different time-scales and creates new opportunities for characterizing protein flexibility.(1) Our main objective is use structural ensembles produced by NMR-restrained Molecular Dynamics for computing the entropy contribution to changes in energy related to flexible protein-protein and protein-ligand docking, a sensitive area for drug discovery projects. One of the first challenges of such analyses is how to describe efficiently important protein motions and identify subpopulation states relevant for understanding protein function based on those ensembles. Here we investigate the application of a differential geometry representation of protein conformations using curvature, torsion and arc-length to the analyses of the dynamics HPV E1-DBD. For E1-DBD conformational phase space sampling, 6 150ns independent molecular dynamics simulations using two different starting points.Using our differential geometry representation was possible to identify two relevant macrostates and important residues position mechanical features of the protein dynamics. This analyses give useful information to identify relevant positions for protein function, allowing to propose a mechanical model for bound to free states transitions based on two groups of residues. The characterization of the phase space using collective variables representing the DNA Binding loop motion points to two equivalent macrostates identified by our method. Given its low computational cost, sensitivity and system independent nature for representing protein structures, this approach have potential to enhance our ensemble analyses capabilities and allow new applications on different structural biology problems beyond the scope of our project. We are now working on the implementation of different clustering algorithms and statistical analyses strategies in order to automate the analyses process of our prototype.

Palavras-chave: Structural bioinformatics. Differential geometry. Biomolecular thermodynamics.

Referências:

1 MONTALVÃO, R. W.; CAMILLONI, C.; DE SIMONE, A. New opportunities for tensor-free calculations of residual dipolar couplings for the study of protein dynamics. **Journal of Biomolecular NMR**, v. 58, n. 4, p. 233-238, 2014. doi: 10.1007/s10858-013-9801-3.

PG181

Novas estratégias para o diagnóstico e tratamento de onicomicose por terapia fotodinâmica.

SILVA, A. P.¹; BAGNATO, V. S.¹; INADA, N. M.¹

paulalsir@yahoo.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A onicomicose é a doença comum na lâmina ungueal, constituindo aproximadamente metade de todos os casos de infecção na lâmina ungueal. Portadores de diabetes, podem ocorrer infecções graves, causando complicações adicionais.(1) O tratamento convencional consiste na administração sistêmica de antifúngicos e antibióticos por períodos de até 24 meses. O aumento de linhagens microbianas resistentes às drogas disponíveis e a alta incidência deste tipo de infecção na população tornam importante o desenvolvimento de novas tecnologias e opções terapêuticas. (2) A Terapia Fotodinâmica (TFD) consiste no emprego do composto fotossensibilizador (FS) ativado por luz em comprimento de onda adequado que, na presença de oxigênio, produz espécies reativas de oxigênio tóxicas que inativam as células alvo (fungos e bactérias).(3) Este estudo teve como objetivo analisar a curcumina como FS utilizando diferentes tipos e marcas de curcuminas, assim como estudos fotofísicos e ensaios *in vitro*. Estudar mecanismos que auxiliam na penetração do FS lâmina ungueal através da utilização de emolientes e novas formulações farmacêuticas. Auxiliar no diagnóstico da doença por imagem infra-vermelho e fluorescência. Tratar os pacientes com onicomicose TFD, com o auxílio de um dispositivo desenvolvido especificamente para esse fim. Para os ensaios *in vitro* testamos como FS a curcumina da Sigma-Aldrich® e outros três variações de PDTPharma® realizou-se estudos fotofísicos como: absorção, fluorescência. Posteriormente realizou-se a inativação por TFD dos principais micro-organismos causadores de onicomicoses como: *Candida albicans*, *mentagrophytes* e *T. rubrum*. A fonte de luz é um equipamento LED emitindo 450 nm e com uma intensidade de 35 mW/cm². Também foi realizado análise estrutural da unha com microscopia eletrônica (MEV), quando aplicamos ureia 40% para a penetração do fármaco. Outros mecanismos para auxiliar na penetração do FS lâmina ungueal incorporando a curcumina em diferentes formulações farmacêuticas como gel e emulsão. Para os ensaios clínicos realizamos imagens de infra-vermelho e fluorescência para auxiliar no diagnóstico de onicomicose. Para o tratamento utilizou-se um dispositivo com comprimento de onda a 450 nm e 100 mW/cm², projetados anatomicamente para pés e mãos. Foi aplicado a curcumina (1,5 mg/mL) em gel ou emulsão e após 30 minutos, a lesão foi iluminada por 20 minutos. Nova avaliação clínica foi efetuada após 7 dias. Os resultados *in vitro* mostraram que as curcumina tiveram um boa estabilidade fotofísicas, e o melhor resultado foi quando utilizamos a mistura de curcumina e curcuminoides, por PDTPharma®. As imagens de diagnóstico mostraram resultados satisfatórios, demonstrando que as imagens de infra-vermelho e fluorescência podem ser complementares para diagnosticar onicomicoses. Os resultados clínicos foram excelentes com a média de 6 sessões de TFD, quando utilizamos a curcumina incorporada em emulsão e média 10 sessões quando em gel. Confirmando a eficácia da TFD utilizando a curcumina como FS para o tratamento da onicomicose. Além disso, o baixo custo do equipamento desenvolvido, a simplicidade de operação são fatores importantes a serem considerados para garantir a implementação desta tecnologia como um tratamento para tal comum infecção.

Palavras-chave: Onicomicose. Terapia fotodinâmica. Diagnóstico.

Referências:

- 1 SMIJS, T.; DAME, Z.; HAAS, E.; AANS, J.-B.; PAVEL, S.; STERENBORG, H. Photodynamic and nail penetration enhancing effects of novel multifunctional photosensitizers designed for the treatment of onychomycosis. **Photochemistry and Photobiology**, v. 90, n. 1, p. 1751-1097, 2014. doi: 10.1111/php.12196 .
- 2 LEDON, J. A.; SAVAS, J.; FRANCA, K.; CHACON, A.; NOURI, K. Laser and light therapy for onychomycosis: a systematic review. **Lasers in Medical Science**, v. 29, n. 2 , p. 823-829, 2014. doi: 10.1007/s10103-012-1232-y .
- 3 DEMIDOVA, T.N.; HAMBLIN, M.R . Effect of cell-photo sensitizer binding and cell density on microbial photoinactivation. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 49, n. 6, p. 2329-2335, 2005. doi: 10.1128/AAC.49.6.2329-2335.2005.

PG182

KBDM utilizando múltiplos truncamentos e clusterização na deconvolução de sinais de espectroscopia in vivo por RM

SILVA, D. M. D. D. da¹; PAIVA, F. F.¹

danielomendes@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Para obtenção da concentração de um determinado composto através da técnica de espectroscopia por RM é necessário obter a intensidade dos respectivos picos formados no domínio da frequência do sinal adquirido. Desta forma, quando os picos apresentam sobreposição, a análise através do formalismo de Fourier torna-se inviável em alguns casos, sendo necessário o uso de métodos matemáticos que envolvem ajustes do sinal em alguma função ou base. Para suprir essa demanda, alguns algoritmos alternativos foram propostos nos últimos anos e, em particular, o KBDM (Krylov Basis Diagonalization Method) tem demonstrado seu potencial. (1) Embora o problema da sobreposição possa ser contornado por este algoritmo, a sua eficácia depende da boa relação sinal-ruído, não comum em análises clínicas, por exemplo. Sendo assim, o objetivo desse trabalho é desenvolver mecanismos que permitam a utilização do KBDM sob tais condições. Em linhas gerais, a aplicação do KBDM consiste na solução do problema de autovalor generalizado, onde as matrizes envolvidas são obtidas através do sinal adquirido no experimento, também conhecido como FID (Free Induction Decay). Os autovalores e autovetores obtidos são usados para reconstruir o sinal através de funções lorentzianas (do ponto de vista da análise espectral). Outra característica importante do KBDM quando aplicado em dados contendo ruído é que se pode obter resultados diferentes para truncamentos distintos do mesmo sinal, que ocorre em função da variação espectral do ruído ao realizar o truncamento. Sendo assim, exploramos o fato de que o mesmo sinal pode ser processado múltiplas vezes utilizando diferentes truncamentos para aplicação de médias, que levam a resultados mais precisos do que a escolha arbitrária de um único truncamento (ou sinal completo). Entretanto, é necessário ressaltar que a saída do algoritmo do KBDM é uma lista formada pelos parâmetros que descrevem cada pico (frequência, amplitude, fase e tempo de relaxação transversal) do tamanho da metade do truncamento do sinal, isto é, para um truncamento de 256 pontos, 128 picos serão obtidos. Quando o sinal é descrito pelo modelo de funções lorentzianas, todos os picos além dos que realmente estão contidos do sinal se anulam, o que deixa de ser verdade na presença de ruído. Quando todos os resultados são visualizados na base tridimensional formada pela amplitude de cada pico, bem como as partes reais e imaginárias dos respectivos autovalores, é possível observar que existem aglomerados, conforme esperado, onde o ponto médio fornece uma estimativa final para cada pico. As componentes formadas pela presença de ruído são dispersas e quando o algoritmo de clusterização baseado em densidade, DBSCAN, é utilizado, apenas as componentes determinísticas são obtidas. (2) Foram utilizados sinais de 2048 pontos, que simulam dados de espectroscopia cerebral, com diferentes níveis de ruído, além de sinais clínicos reais. Os resultados com sinais simulados e reais apresentam níveis de resíduo satisfatórios, indicando potencial na estratégia desenvolvida. Estudos quantitativos para avaliar a qualidade dos resultados estimados ainda são necessários e é o próximo passo deste projeto de pesquisa.

Palavras-chave: KBDM. Espectroscopia. Deconvolução.

Referências:

1 MANDELSHTAM, V. A. et al. Application of the filter diagonalization method to one- and two-dimensional NMR spectra. **Journal Magnetic Resonance**, v. 133, n. 2, p. 304-312, 1998. doi: 10.1006/jmre.1998.1476.

2 ESTER, M. et al. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON KNOWLEDGE AND DATA MINING, 2, KDD96, 1996, Portland, Oregon. **Proceedings...** Menlo Park: AAAI Press, 1996.

PG183

Elucidação de mecanismos estruturais da homeostase do c-di-GMP

SILVA, E. E. D.¹; CARDOSO, A. R.¹; MENEGHELLO, R.¹; NAVARRO, M. V. A. S.¹

everton.edesio.silva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Esse trabalho tem o intuito de esclarecer mecanismos estruturais de transdução de sinal de proteínas que controlam a concentração intracelular bacteriana da molécula c-di-GMP. A importância de tal conhecimento reside que essa molécula já é descrita amplamente atuando sobre efetores de fenótipos relacionados direta ou indiretamente com a alternância entre biofilme (vida sessil colônial) e a vida livre.(1) E os biofilmes, por sua vez, chamam a atenção da comunidade científica pelos prejuízos causados na indústria (contaminação de reservatórios e corrosão de tubulações) e na medicina (agravamento de infecções e deterioramento de dispositivos médicos), como também pelo crescente número de suas aplicações em biotecnologia (bioremediação e células combustíveis). Apesar da importância do c-di-GMP no controle do biofilme e do já bem estabelecido mecanismo de catálise dos domínios que o produzem (GGDEF) ou que o degradam (EAL ou HD-GYP), (2) o conhecimento sobre os sinais que ativam esses domínios são poucos. Chegam a ser inexistentes, quando se trata de proteínas transmembrana. Em vista disso, está sendo desenvolvido o estudo de proteínas transmembranares das vias do c-di-GMP contendo o domínio periplasmático sensor CHASE, já que estão frequentemente associados.(3) Estruturas sensoras semelhantes ao CHASE e de outros sistemas de sinalização capturam o sinal extracelular (que podem contar com o auxílio de uma segunda proteína) e transmitem a informação através da membrana para os domínios intracelulares. Para estudo foram selecionadas proteínas de dois microrganismos causadores de entraves ao homem. Em *Pseudomonas aeruginosa*, importante hospedeiro oportunista e modelo para estudo de biofilme, foi encontrado duas proteínas (codificadas nos genes PA0847 e PA2072), as quais possuem o domínio CHASE4. Em *Xanthomonas citri*, importante fitopatógeno de cítricos, foi identificado duas proteínas (XAC1345 e XAC1488), ambas detentoras do CHASE3. Avanços importantes foram obtidos com construções da PA0847 de *P. aeruginosa* que possui, além do CHASE, os domínios regulatórios HAMP e PAS. Análises de atividade em HPLC mostraram que o domínio HAMP é fator determinante da atividade. Testes de duplo-híbrido bacteriano mostraram que a PA0847 possui três parceiros de interação. Dois deles interagem através das porções N-terminais da PA3343 e PA1851, que dividem o mesmo padrão de aminoácidos conservados, nunca antes descrito na literatura. O terceiro parceiro é a já descrita na literatura como RegA ou ToxR (PA0707), regulador da produção da exotoxina A (EXA), um poderoso fator de virulência extracelular. Ensaios de pull-down indicaram ainda que a interação entre PA0847 e PA3343 é dependente de c-di-GMP. Duplos-híbridos com construções menores da PA0847 indicaram que a interação com a RegA ocorre pelo domínio PAS. Esses resultados podem ajudar a compreender de maneira geral a dinâmica entre domínios regulatórios, como HAMP, PAS e CHASE, com domínios da via do c-di-GMP. Além disso, as caracterizações de um domínio de interação dependente de c-di-GMP e da relação do regulador da EXA nas vias do dinucleotídeo cíclico são inéditas. Futuramente, o conhecimento adquirido pode contribuir tanto no avanço das técnicas de eliminação bacteriana como também na criação e na melhoria de tecnologias para aplicações de biofilmes.

Palavras-chave: Biofilme. c-di-GMP. Sinalização.

Referências:

- 1 COSTERTON, J. W.; STEWART, P. S.. Battling biofilms. **Scientific American**, v. 285, n. 1, p. 75-81, 2001.
- 2 MILLS, E. et al. The bacterial second messenger c-di-GMP: mechanisms of signalling. **Cellular Microbiology**, v. 13, n. 8, p. 1122-1129, 2011. doi: 10.1111/j.1462-5822.2011.01619.x.
- 3 ZHULIN, I. B. et al. Common extracellular sensory domains in transmembrane receptors for diverse signal transduction pathways in Bacteria and Archaea. **Journal of Bacteriology**, v. 185, n. 1, p. 285-294, 2003. doi: 10.1128/JB.185.1.285-294.2003.

PG184

Electron paramagnetic resonance study of vanadium oxide nanosquares

SILVA, I. D. A.¹; NAVAS, D.²; GONZALEZ, G.²; MAGON, C. J.¹; GONZALEZ, J. P. D.¹

idas.fisica@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Facultad de Ciencias - Universidad de Chile

The magnetic properties of vanadium oxide nanomaterials, especially nanotubes, have been the focus of several researches in recent years. (1-3) In this study, we investigate the magnetic properties of vanadium oxide nanosquares using continuous wave electron paramagnetic resonance (CW-EPR) techniques at X-Band (9.5 GHz): angular variation and temperature variation. Two samples prepared using standard methods by or collaborators in Chile were used in this study, differing themselves by the hydrothermal treatment time: 1/2D (half-day) and 3D (three days). The samples were centrifuged, suspended in an alcoholic solution, and deposited in ten 22x3 mm glass plates, which were glued together. For sample 3D, EPR spectra at room temperature displays two prominent signals at $g = 1.95$ (very intense) and $g = 2.01$ (very weak). The first one is related to V^{4+} ions in tetrahedral sites and the last one is related to $V(IV)$ in octahedral sites, were both $V(IV)$ and $V(V)$ coexists [1]. Unfortunately, there was no powder left for sample 1/2D. The angular variation of the EPR spectrum were performed at room temperature and 20K for sample 3D and at 50 K and room temperature for sample 1/2D. Both samples presented a visible angular variation and the best fit of these spectra were made using four Lorentzian lines. The temperature variation of the EPR spectra was undertaken between 6 K and 300 K for both samples. The best fit of these spectra were made with four Lorentzian lines and the variation of the inverse of the EPR signal area for the narrowest line (near $g = 1.95$) follows a Curie law for high temperatures, a Curie-Weiss law with Curie-Weiss temperature less then 0 for low temperatures; intermediated by a superposition of these two behaviors. We acknowledge the financial support of CAPES and FAPESP/CeRTEV (Center of Research, Technology, and Education in vitreous materials; FAPESP 2013/07796-6).

Keywords: EPR. Vanadium oxide. Nanosquare.

Referências:

- 1 KRUSIN-ELBAM, L. et al. Room-temperature ferromagnetic nanotubes controlled by electron or hole doping. **Nature**, v. 431, p. 672-676, 2004. doi: 10.1038/nature02970.
- 2 VAVILOVA, E. et al.. Magnetic properties of vanadium oxide nanotubes probed by static magnetization and V^{51} NMR. **Physical Review B**, v. 73, n. 14, p. 144417, 2006. doi: 10.1103/PhysRevB.73.144417.
- 3 DEMISHEV, S. V. et al. Magnetic properties of vanadium oxide nanotubes and nanolayers. **Physical Review B**, v. 84, n. 9, p. 094426, 2011. doi: 10.1103/PhysRevB.84.094426.

PG185

Vibrational cooling of Rb_2 and KRb molecules

SILVA, P. C. V.¹; PASSAGEM, H.¹; COLIN, R.¹; MARCASSA, L. G.¹

paulo.pc.vs@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ultracold molecules have been theoretically proposed for several applications, such as quantum phase transitions and quantum information. (1) There is already a well known technique to produce molecules in the fundamental ro-vibronic level, but its complexity and expensiveness makes it able only for large research groups. In our laboratory, we are working on a different technique, which requires fewer lasers and less costly equipments. We first trap and cool ^{85}Rb and ^{39}K atoms in a hybrid magneto-optical trap (MOT), where they reach temperatures around some hundreds of μK . In this trap, molecules of KRb and Rb_2 are produced via photoassociation process: atomic pairs are excited from $^1\Sigma_g^+$ state to $^1\Sigma_u^+(0_u^+)$ by a laser at 795 nm; after some time, spontaneous emission takes the pairs back to the ground electronic level, but preferentially in a bound (molecular) state. The vibrational levels of the so formed molecules are high, usually around $\nu = 80$; so the next step is to optically pump the molecules to the fundamental level $\nu = 0$. This is firstly done by a broadband fiber laser in 1071 nm, which takes the molecules below $\nu = 20$. The optical pumping process will be completed by a superluminescent diode, which has to be band-cut to avoid transitions from $\nu = 0$ to higher states. (2) In the present moment, we are working exclusively with rubidium, and recent results showed that we successfully produced molecules with this technique. Using a femtosecond pulsed laser, we were able to ionize some of the formed molecules and detect them in a *channeltron* ion detector. Furthermore, in a recent paper (3), we showed that our fiber laser in 1071 nm can also form molecules by a similar process. We are now working towards the vibrational cooling of those molecules, preparing the band-cut light to be used. We are also working on the KRb molecules experimental setup. After completing this stage, our next goal is to make the same experiment in an optical dipole trap (ODT), performed with the same fiber laser in 1071 nm. This trap has the advantage of holding a greater density (200 times the MOT density). Once proven to be viable, this technique will be a breakthrough for the production of ultracold molecules, opening horizons to several applications.

Keywords: Molecular physics. Photoassociation. Vibrational cooling.

Referências:

- 1 DEMILLE, D. Quantum computation with trapped polar molecules. **Physical Review Letters**, v. 88, n. 6, p. 067901-1-067901-4, 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.88.067901.
- 2 SOFIKITIS, D; HORCHANI, R.; LI, X.; PICHLER, M.; ALLEGRI, M.; FIORETTI, A.; COMPARAT, D.; PILLET, P. Vibrational cooling of cesium molecules using noncoherent broadband light. **Physical Review A**, v. 80, n. 5, p. 051401-1-051401-4, 2009. doi: 10.1103/PhysRevA.80.051401.

3 MENEGATTI, C. R.; MARANGONI, B. S.; MAAFA, N. B.; DULIEU, O.; MARCASSA, L. G. Trap loss in a rubidium crossed dipole trap by short-range photoassociation. **Physical Review A**, v. 87, n. 5, p. 053404-1-053404-6, 2013. doi: 10.1103/PhysRevA.87.053404.

PG186

Reformulação da abordagem pedagógica de kits da Experimentoteca do CDCC/USP em parceria com professores em formação

SILVA, R. M. A. A.¹; SILVA, C. C.¹

rosanna.silva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Na aprendizagem de Ciências Naturais, as atividades experimentais devem ser garantidas de maneira a evitar que a relação teoria-prática seja transformada numa dicotomia. Experimentos despertam, em geral, grande interesse nos alunos, além de propiciar situações de investigação. Quando planejados levando em conta estes fatores, eles constituem momentos particularmente ricos no processo de ensino-aprendizagem. O trabalho experimental deve dar margem à discussão e interpretação de resultados obtidos (quaisquer que tenham sido), com o professor atuando no sentido de apresentar e desenvolver conceitos, leis e teorias científicas. (1) A Experimentoteca do CDCC possui um acervo de kits com materiais e roteiros para práticas experimentais. Estes kits tornam possível o contato dos alunos com a experimentação em sala de aula, sem a necessidade de um espaço específico como um laboratório. Tal coleção foi desenvolvida nas décadas de oitenta e noventa e hoje utilizam abordagem pedagógica considerada ultrapassada. A inovação da coleção está em andamento em um projeto de grande monta intitulado 'Ampliação e Atualização da Experimentoteca CDCC-USP', financiado pelo CNPq no edital 85/2013-Linha 2, que visa o desenvolvimento de atualização material e pedagógica dos kits da Experimentoteca. A proposta deste projeto é utilizar os chamados 'três momentos pedagógicos' (3MP), uma abordagem didático-pedagógica fundamentada pela perspectiva freiriana, como referencial para sustentar a reestruturação de roteiros de práticas experimentais. Trata-se da transposição da concepção de educação de Paulo Freire para o espaço de educação formal que prioriza o desenvolvimento da autonomia do aprendiz. (2) A metodologia de desenvolvimento a ser usada se baseia nos 'ciclos de reflexão' que são ações contínuas de pesquisa que proporcionam suporte didático e pedagógico, visando a parceria entre professores e pesquisadores, além de guiar todas as ações da pesquisa. (3) De forma resumida, os ciclos de reflexão buscam concretizar parcerias e organizar o trabalho colaborativo de desenvolvimento e pesquisa. Após a constituição do grupo de trabalho envolvendo pesquisadores (no caso a bolsista e sua orientadora) e licenciandos, inicia-se o trabalho coletivo de pesquisa e desenvolvimento. A terceira etapa envolve aplicação, avaliação e novas adaptações a partir dos resultados da aplicação das sequências de ensino-aprendizagem. Para a aplicação e posterior avaliação do resultado da reformulação dos roteiros, trabalharemos em parceria com alunos de Licenciatura em Ciências Exatas, na disciplina de Estágio Supervisionado.

Palavras-chave: Três momentos pedagógicos. Práticas experimentais. Ciclos de reflexão.

Referências:

1 DELIZOICOV, D.; ANGOTTI, J. A. **Metodologia do ensino de ciências**. São Paulo: Cortez, 2000.

22 p.

2 MUENCHEN, C. **A disseminação dos três momentos pedagógicos: um estudo sobre práticas docentes na região de Santa Catarina.** 2010. 273p. Tese (Doutorado) - Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Centro de Ciências da Educação, Centro de Ciências Biológicas, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2010.

3 COLOMBO JUNIOR, P. D. **Inovações curriculares em ensino de física moderna: investigando uma parceria entre professores e centro de ciências.** 2014. 254p. Tese (Doutorado) - Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências, USP, São Paulo, 2014.

PG187

Técnica para análise de fenômenos de tempo curto

SILVA, R. M. da¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

ramises.martins@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Neste projeto manipulamos a equação mestra para processos markovianos que governa o movimento do operador densidade do sistema analisado (1) no que diz respeito a sua expansão temporal. Com esse estudo aplicamos os resultados obtidos para uma outra expansão de uma medida relacionada com o operador densidade derivado da equação mestra. Assim podemos ter uma medida aproximada de medidas de tempos curtos, como é o caso do tempo de decoerência (analisado também em (2) mas por meio de outra técnica) e a superradiância de sistemas de dipolos magnéticos. (3) Mais especificamente, no caso da análise do tempo de decoerência para um sistema em contato com o vácuo, expandimos a equação:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{\Gamma}{2}[2a\rho(t)a^\dagger - a^\dagger a\rho(t) - \rho(t)a^\dagger a] \quad (3)$$

E então utilizamos o defeito de idempotência dado por:

$$\delta(t) = 1 - \text{Tr}\rho(t)^2 \quad (4)$$

Já para estimativa do tempo de superradiância expandimos:

$$\frac{d\rho_N(t)}{dt} = -\frac{i\omega_0}{2}[S_z, \rho_N] - \frac{(\bar{n} + 1)\Gamma}{2}[S_+ S_- \rho_N(t) - 2S_- \rho_N(t) S_+ + \rho_N(t) S_+ S_-] \quad (5)$$

$$-\frac{\bar{n}\Gamma}{2}[S_- S_+ \rho_N(t) - 2S_+ \rho_N(t) S_- + \rho_N(t) S_- S_+] \quad (6)$$

E utilizamos a medida de energia do sistema:

$$\text{Tr}(\rho(t)S_z) \quad (7)$$

Com essa técnica podemos analisar outras medidas e simplificar o alcance de resultados antes derivados de soluções analíticas mais complexas.

Palavras-chave: Decoerência. Superradiância. Sistemas Markovianos.

Referências:

- 1 SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. **Quantum optics**. Cambridge, NY: Cambridge University Press, 1997. 652 p.
- 2 KIM, J. I. et al. Perturbative expansion for coherence loss. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 2, p. 207, 1996.

3 MIZRAHI, S. S.; MEWES, M. A. Pulsed superradiant emission from a magnetic dipole system. **International Journal of Modern Physics B**, v. 7, n. 12, p. 2353-2365, 1993. doi: 10.1142/S0217979293002882 .

PG188

Determination of protein-protein complexes from sparse experimental data

SILVA, S. R.¹; MONTALVÃO, R. W.¹

samuelsilva@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The great majority of cellular processes depend on the formation of transient or permanent macromolecular complexes. Structural information about these complexes at low to intermediate resolution can be obtained through a range of techniques. When structures at high resolution are instead required, X-ray crystallography is yet unrivalled. There are, however, often cases in which it is possible to crystallize the molecular units individually but not as a complex, or in which a crystal can be obtained for a complex but not in a biologically relevant conformation. Several computer programs have been developed for high-resolution protein-protein docking. The objective of this project is to develop new computational approaches for determining the structures of protein-protein complexes using sparse experimental information. For that, it is being developed a new computer program using data derived from EPR Double Electron-Electron Resonance (DEER) and Cryo-Electron Microscopy (Cryo-EM). We have identified the combined use of advanced geometric models (1) with chemical shifts from NMR spectroscopy, EPR Double Electron-Electron Resonance and Cryo-Electron Microscopy as the most promising approach for this purpose, since the experimental data is readily measurable, at least with respect to other observables, and comparatively rich in structural information. This system will complement the Chemical Shift based approach used by CamDock. (2) Our intention is to provide a new standard tool to the structural biology community to determine the structures of large complexes, which are the basic functional units in the cell, rather than the structures of individual proteins or small complexes, which currently represent the vast majority of the structures in the Protein Data Bank. It is expected that the use of complementary experimental data will allow us to improve the quality of protein-protein modelling.

Keywords: Docking. Proteínas. Simulação.

Referências:

- 1 DUNCAN, B. S.; OLSON, A. J. Approximation and characterization of molecular surfaces. **Biopolymers**, v. 33, n. 2, p. 219-229, 1993. doi: 10.1002/bip.360330204.
- 2 MONTALVÃO, R. W. et al. Structure determination of protein-protein complexes using NMR chemical shifts: case of an endonuclease colicin-immunity protein complex. **Journal of the American Chemical Society**, v. 130, n. 47, p. 15990-15996, 2008. doi: 10.1021/ja805258z .

PG189**Dinâmica de um condensado de Bose-Einstein contendo sólitons**SMAIRA, A. F.¹; CARACANHAS, M. A.¹; BAGNATO, V. S.¹

andre.smaira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Condensados de Bose-Einstein (BEC) são sistemas macroscópicos excelentes para a observação do comportamento quântico da matéria. Desde sua obtenção experimental em gases atômicos alcalinos diluídos aprisionados por campos magnéticos, (1) há importantes aspectos relacionados a esse sistema que foram intensamente explorados, como os modos coletivos do BEC harmonicamente aprisionado, (2) seu tunelamento através de barreiras de potencial e os estados excitados desse sistema, incluindo vórtice (3) e sóliton. O último consiste de pacote de onda localizado, que propaga sem mudança de forma. Nesse trabalho, investigamos os novos aspectos que surgem da dinâmica de um sistema composto (condensado aprisionado contendo um sóliton). Há muitos estudos tratando cada parte separadamente: estado fundamental do BEC ou um sóliton em um BEC infinito uniforme estacionário. Estamos nos baseando nessas análises prévias, além da simulação numérica de campo médio do nosso sistema submetido a diferentes condições iniciais (BEC aprisionado no mínimo do potencial harmônico ou BEC deslocado na armadilha contendo um sóliton, além de uma deformação no potencial) para caracterizar a dinâmica desse sistema. Alguns dos nossos resultados puderam ser explicados por meio de previsões analíticas da chamada aproximação de Thomas-Fermi.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Matéria condensada. Átomos ultra-frios.**Referências:**

- 1 KETTERLE, W.. Nobel lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein condensation and the atom laser. **Reviews of Modern Physics**, v. 74, n. 4, p. 1131, 2002. doi: 10.1103/RevModPhys.74.1131.
- 2 MENOTTI, C.; STRINGARI, S.. Collective oscillations of a one-dimensional trapped Bose- Einstein gas. **Physical Review A**, v. 66, n. 4, p. 043610, 2002.
- 3 FETTER, A. L.; SVIDZINSKY, A. A.. Vortices in a trapped dilute Bose-Einstein condensate. **Journal of Physics C**, v. 13, n. 12, p. R135, 2001.

PG190

Superabsorção via engenharia de interações átomo-campo e a derivação do princípio de Landauer a partir da segunda lei da termodinâmica

SOARES, P. M.¹; MOUSSA, M. H. Y.¹

pmsoares02@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Uma vez constatada a natureza discreta da luz, o estudo da sua interação em escala microscópica com a matéria trouxe consequências que vão desde o advento da Mecânica Quântica em 1900 com o trabalho de Planck sobre a radiação de corpo negro até a invenção do laser. A abordagem de aspectos clássicos do eletromagnetismo sob o respaldo da teoria quântica fez surgir uma nova área, conhecida como óptica quântica, que veio a se tornar um terreno fértil para a realização dos protocolos propostos em informação e computação quântica. Originalmente previsto por Dicke em 1954, o fenômeno da superradiância tem gerado grande interesse desde então por se tratar de um efeito transiente coletivo. (1) O sistema é composto por N átomos de dois níveis que interagem com um particular modo do campo de radiação, por exemplo, o presente numa cavidade que por hipótese possui baixo fator de qualidade. Mesmo tratando-se de uma amostra moderadamente densa, os átomos não interagem de forma direta. Caso a relaxação ocorra num intervalo de tempo suficientemente longo, as correlações entre os momentos de dipolo atômicos, induzidas via campo, ocasionarão a emissão de um pulso superradiante cuja intensidade é proporcional a N^2 , diferente da emissão incoerente que possui intensidade proporcional a N . Em outras palavras, a energia armazenada em cada um dos átomos é transferida de forma ordenada para o campo em uma certa taxa a depender do estado inicial em que o sistema é preparado. Dado que existe a superradiância e que o ferramental para estudá-la está consolidado, seria possível criar a superabsorção por meio da engenharia de interações átomo-campo? (2) De imediato, este resultado viabilizaria o "super-átomo". A termodinâmica quântica tem recebido destaque por utilizar-se de conceitos macroscópicos como trabalho e calor para o estudo de sistemas físicos microscópicos. Recentemente, mostrou-se que o trabalho líquido num certo ciclo é limitado pelo princípio de incerteza entrópico e que violá-lo implicaria na violação da segunda lei da termodinâmica! (3) Por sua vez, a escolha errada da medida durante uma de suas etapas leva à realização de trabalho pelo agente externo sobre o ciclo, o que pode estar conectado com o princípio de Landauer. Apoiados nos sistemas físicos da óptica quântica esperamos responder tais questões e outras que por ventura surgirem.

Palavras-chave: Óptica quântica. Informação quântica. Super-radiância.

Referências:

- 1 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review**, v. 93, n. 1, p. 99-110, 1954.
- 2 HIGGINS, K. D. B. Superabsorption of light via quantum engineering. **Nature Communications**, v.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

5, p. 4705-1-4705-7, 2014. doi: 10.1038/ncomms5705.

3 HANGGI, E.; WEHNER, S. A violation of the uncertainty principle implies a violation of the second law of thermodynamics. **Nature Communications**, v. 4, p. 1670-1-1670-5, 2013. doi: 10.1038/ncomms2665.

PG191

Lifetime of InAs/GaAs quantum dots placed near thin metallic films

SOBREIRA, F. W. A.¹; PEREIRA, R. G.¹; MAREGA JUNIOR, E.¹

fwellysson@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The study of the interaction of surface plasmon polaritons (SPPs) with quantum emitters has become very important in the last few years. Besides the propagation of SPPs is observed a strong confinement of light. As a result of this confinement the electromagnetic field (EMF) can be enhanced by many orders of magnitude. These high EMF strongly interacts with the medium in which it propagates and using this strong interaction we have the ability to design optical devices as well as investigate the exotic physics of strongly interacting systems. (1,2) Some studies have shown that under some restrictive conditions it was observed that the Photoluminescence (PL) spectra of quantum emitters placed near metallic nanoparticles (NPs) may increase or decrease depending on the density of these NPs (3) and also change its peak position. However, the relative position between the quantum emitters and the metallic NPs is not well controlled on these systems, and there is a misunderstanding if the results are due to high EMF confinement or whether they are due to the resonances of these metallic NPs. In our case, we have focused on the control of the distance between the quantum emitter and the metal/dielectric interface. We used a Molecular Beam Epitaxy technique in which the distance between a quantum emitter and a metallic thin film can be measured within a precision of an atomic layer. We went a step further and measured the lifetime of excitons confined in a InAs/GaAs quantum dot into SPP modes confined in a metallic thin film made of Au, an important step toward the investigation of the basic features of the SPP-exciton interaction. The lifetime of the ground state level was investigated and shown to decrease with the presence of the metallic film.

Palavras-chave: Quantum dots. Surface plasmons. Strong coupling.

Referências:

- 1 MAIER, S. A.; BRONGERSMA, M. L.; KIK, P. G.; MELTZER, S.; REQUICHA, A. A. G.; ATWATER, H. A. Plasmonics: a route to nanoscale optical devices. **Advanced Materials**, v. 13, n. 19, p. 1501-1505, 2001. doi: 10.1002/1521-4095(200110)13:19<1501::AID-ADMA1501>3.0.CO;2-Z.
- 2 CARUSOTTO, I.; CIUTI, C. Quantum fluids of light. **Reviews of Modern Physics**, v. 85, n. 1, p. 299-366, 2013. doi: 10.1103/RevModPhys.85.299.
- 3 KULAKOVICH, O.; STREKAL, N.; YAROSHEVICH, A.; MASKEVICH, S.; GAPONENKO, S.; NABIEV, I.; WOGGON, U.; ARTEMYEV, M. Enhanced luminescence of CdSe quantum dots on gold colloids. **Nano Letters**, v. 2, n. 12, p. 1449-1452, 2002. doi: 10.1021/nl025819k.

PG192

Física estatística de chuueiros atmosféricos extensos

SOUSA, G. T. T.¹; SOUZA, V.¹

tomishiyo@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este trabalho visa investigar o desenvolvimento de chuueiros atmosféricos extensos de altas energias utilizando ferramentas de física estatística de forma a entender as subdivisões de energia e concentrações observadas nos dados dos detectores de superfície do Observatório Pierre Auger. Um tratamento adequado e detalhado do ponto de vista estatístico do chuueiro é um desafio imenso dado o número de partículas envolvidas e a miríade de fenômenos físicos fundamentais em questão. Além de tentar descrever as flutuações espúrias encontradas nos dados do Observatório Pierre Auger, este trabalho tem como objetivo elaborar um tratamento mais adequados das técnicas de simulação conhecidas como Thinning e Unthinning. Essas técnicas, largamente utilizada para a simulação de eventos com energia acima de 10^{18} eV requerem de uma justificativa estatística mais sólida. A preocupação com a técnica se justifica, na medida em que flutuações na densidade de partículas simulada como função da distância ao eixo do chuueiro podem impactar as análises de dados de raios cósmicos de altas energias. Analisaremos a eficiência da técnica ao estudar seu efeito sobre o modelo de Heitler-Matthews (1) cuja física é bem compreendida. Ao investigar o desenvolvimento do chuueiro, será possível verificar a eficiência do modelo atual ou propor correções para melhoria do mesmo. O trabalho será desenvolvido com o uso de softwares de simulação de chuueiros atmosféricos extensos (CORSIKA e CONEX). (2) Analisando o desenvolvimento de chuueiros simulados desenvolveremos um tratamento estatístico que descreva as flutuações das partículas no nível do chão. Por últimos, procuraremos comprovações do modelo estatístico desenvolvido com base nas simulações nos dados do Observatório Pierre Auger, bem como possíveis divergência em relação a simulações que podem estar presente nos chuueiros reais. (3) Se possível desenvolveremos um técnica alternativa de thinning/unthinning baseada em um modelo mais robusto do chuueiro levando em conta um tratamento estatístico detalhado.

Palavras-chave: Chuueiros atmosféricos extenso. Física estatística. Análise de dados do observatório Pierre Auger.

Referências:

- 1 MATTHEWS, J. A Heitler model of extensive air showers. **Astroparticle Physics**, v. 22, p. 387-397, 2005.
- 2 HECK, D. et al. **CORSIKA**: a Monte Carlo code to simulate extensive air showers. Disponível em: <<https://inspirehep.net/record/469835/files/FZKA6019.pdf>> Acesso em: 08 set.2015.
- 3 RISSE, M.; HECK, D. Energy release in air showers. **Astroparticle Physics**, v. 20, n. 6, p. 661-667, 2004. doi: 10.1016/j.astropartphys.2003.10.006.

PG193

Relações quantitativas entre a estrutura e atividade para uma série de antichagásicos derivados do fenarimol

SOUZA, A. S.¹; FERREIRA, L. L. G.¹; ANDRICOPULO, A. D.¹

anacletoasilvadesouza@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A doença de Chagas é uma das doenças tropicais negligenciadas prioritárias para a Organização Mundial da Saúde (OMS). Endêmica na América Latina, é considerada atualmente um problema de saúde mundial, afetando diversos países na América do Norte, Europa, Ásia e Oceania. Estima-se que 8-10 milhões de pessoas estejam infectadas com o protozoário *Trypanosoma cruzi*. O tratamento disponível é limitado a dois fármacos que apresentam baixa eficácia e sérios efeitos adversos, o que torna evidente a urgência por novas alternativas terapêuticas. Esse trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de estudos das relações quantitativas entre a estrutura e atividade (QSAR, na sigla inglesa para quantitative structure-activity relationships) para duas séries de derivados do fenarimol com atividade anti-T. cruzi. Os compostos selecionados possuem considerável potência in vitro contra o parasita, além de atividade in vivo em modelos experimentais da doença, o que caracteriza o seu potencial para estudos em química medicinal. (1-2) Neste contexto, estratégias de planejamento de fármacos foram utilizadas para a geração de modelos de QSAR preditivos. Foram selecionados dois conjuntos de dados bem qualificados a partir dos trabalhos de Keenan e colaboradores (1-2), e posteriormente foram selecionados as séries treinamento e teste para os respectivos conjuntos de dados. Foram utilizados os métodos holograma QSAR (HQSAR, na sigla inglesa para hologram QSAR); análise comparativa dos campos moleculares (CoMFA, na sigla inglesa para comparative molecular field analysis); e análise comparativa dos índices de similaridade estrutural (CoMSIA, na sigla inglesa para comparative molecular similarity indices). Os modelos gerados possuem alta capacidade de correlação interna e de predição externa, indicando também um conjunto de características estruturais responsáveis pela atividade anti-T. cruzi. Os resultados apresentados deste trabalho são úteis para planejamento racional de novos fármacos derivados do fenarimol com propriedades antichagásicas.

Palavras-chave: Química medicinal. Doença de Chagas. QSAR.

Referências:

- 1 KEENAN, M. et al. Analogues of fenarimol are potent inhibitors of *Trypanosoma cruzi* and are efficacious in a murine model of Chagas disease. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 55, n. 9, p. 4189-4204, 2012.
- 2 KEENAN, M. et al. Design structure activity relationship and in vivo efficacy of piperazine analogues of fenarimol as inhibitors of *Trypanosoma cruzi*. **Bioorganic and Medicinal Chemistry**, v. 21, n. 7, p. 1756-1763, 2013.

PG194

Crystal structure and kinetic of Q289L a mutating catalytic residue in Methylthioadenosine Phosphorylase (MTAP) enzyme from *Schistosoma mansoni*

SOUZA, J. R. T.¹; RADDI, M. M.²; BRANDÃO NETO, J.³; PEREIRA, H. M.¹

jutorini@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Centro Universitário Central Paulista - UNICEP

³Diamond Light Source - DLS

The *Schistosoma mansoni* parasite is the causer of schistosomiasis, a chronic negligible illness that affects approximately 207 million people worldwide with approximately 6 million in Brazil. (1) The parasitic illness are the leading cause of deaths in developing countries, and receives little or no attention from drug companies to develop therapies. The MTAP enzyme (EC 2.4.2.28) is a member of the nucleoside phosphorylase family, catalyzing their natural substrate 5'-deoxy-5'-methylthioadenosine (MTA). However in *S. mansoni*, this enzyme has able to use adenosine as alternative substrate producing adenine to purine salvage pathways. (2) The *Schistosoma mansoni* parasite does not possess the de novo pathway for purine bases biosynthesis therefore depends entirely on salvage pathways for its purine requirement. The adenosine conversion to adenine makes this enzyme a key component of the pathway, in opposition to the Human enzyme which is unable to make this conversion. (3) This study was aimed at understanding the catalytic mechanism in MTAP catalysis, particularly the role of the catalytic residues in the adenosine cleavage. The structural alignment with catalytic site from human MTAP has revealed important active site residue substitutions that can supply details about the preference to adenosine substrate. The substitution of Glutamine to Leucine at 289 position is especially important in view of this is the only residue that interacts in active site from neighbor chain. The catalytic residue Q289 was mutated individually by Mutagenix company, the mutant was characterized by X-ray crystallography on the Diamond Light Source (DLS) and kinetic assay was performed by a coupled system with Xanthine Oxidase, used for indirectly measure adenine through of the 2,8-dihydroxyadenine formation at 305 nm. The MTAP mutant Q289L complexed structure with tubercidin was obtained at 1.7 Å of resolution in the space group P2₁. Once that the side chain from leucine is smaller than glutamine side chain, the mutation of Q289 resulted in the loss of interaction between this residue and the ligand in active site and broke the interaction between chains. Kinetic assay has showed a large decrease in enzymatic activities, the K_M / K_{cat} constant was about fifteen times less to MTA substrate and about four times less to adenosine substrate, highlighting the importance of these residues in the efficiently catalysis. These results not only emphasize the role that the MTAP in purine salvage pathways but also demonstrate a significant difference between *S. mansoni* and human catalytic site from MTAP.

Keywords: Phosphorylase. MTAP. *Schistosoma mansoni*.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Schistosomiasis**. Fact sheet nº115. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs115/en/>>. Acesso em: 04 set. 2015.
- 2 SOUZA, J. R. T. **Determinação estrutural e funcional da enzima 5'-deoxi-5'-metiltioadenosina Fosforilase de Schistosoma mansoni**. 2012. 92p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.
- 3 SENFT, A. W.; SENFT, D. G.; MIECH, R. P. Pathways of nucleotide metabolism in *Schistosoma mansoni*. II. Disposition of adenosine by whole worms. **Biochemical Pharmacology**, v. 22, n. 4, p. 437-447, 1973. doi: 10.1016/0006-2952(73)90285-2.

PG195

Planejamento de inibidores da enzima cruzaina de *Trypanosoma cruzi*

SOUZA, M. L.¹; FERREIRA, R. S.²; SLAFER, B.³; REZENDE JUNIOR, C. O.³; DIAS, L. C.³; ANDRICOPULO, A. D.¹

marianalaureano@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Departamento de Bioquímica e Imunologia - UFMG

³Laboratório de Química Orgânica e Sintética - UNICAMP

A doença de Chagas, uma infecção causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, é um grave problema de saúde na América Latina e uma doença emergente em países não endêmicos, sendo considerada pela Organização Mundial de Saúde (OMS) uma doença tropical negligenciada de alta prioridade em seus programas de pesquisa e desenvolvimento. Além de sua relevância clínica, ela também se torna importante no setor econômico. A mortalidade precoce e a incapacidade significativa causadas por esta doença, que muitas vezes afeta a população de adultos jovens, resultam em um grande impacto social e econômico, incluindo desemprego e diminuição da capacidade produtiva. A terapia disponível é limitada e insatisfatória sendo necessária a identificação de novas alternativas terapêuticas. (1) A enzima cruzaina (EC 3.4.22.51) é a principal cisteína protease do *T. cruzi* e desempenha importante papel nos processos de nutrição do parasita, invasão celular e evasão do sistema imune do hospedeiro, sendo considerada um dos alvos mais importantes para o desenvolvimento de novos fármacos para a doença de Chagas. (2) Neste contexto, o objetivo do trabalho é desenvolver novos inibidores da cruzaina, aplicando de forma combinada e integrada, estratégias experimentais e computacionais em química medicinal e planejamento de fármacos (estudos estruturais, síntese dos compostos, expressão e purificação da enzima, ensaios cinéticos e celulares e dinâmica molecular). Como ponto de partida para a otimização molecular e o planejamento racional baseado na estrutura, utilizamos como composto líder um potente inibidor da cruzaina (valores de $IC_{50} = 1,0 \pm 0,1 \text{ uM}$ e $K_i = 0,58 \text{ uM}$), previamente identificado em nosso grupo através de técnicas computacionais e experimentais, que também apresenta atividade anti-*T. cruzi* ($IC_{50} = 3,40 \pm 0,08 \text{ uM}$). (3) A fim de aprofundar o entendimento das relações entre a estrutura e atividade (SAR, sigla inglesa para *structure-activity relationships*), um conjunto com 18 análogos do composto líder foram sintetizados e avaliados contra a cruzaina. Os compostos mais potentes foram avaliados *in vitro* contra o *T. cruzi*. Um conjunto promissor de compostos foi selecionado com valores de IC_{50} contra a enzima na faixa de nano- e micromolar e, em alguns casos, com atividade contra o *T. cruzi* em concentrações micromolares. Entre os análogos, merece destaque o composto 12, um inibidor competitivo, com alta potência e afinidade pela enzima alvo (valores de $IC_{50} = 0,12 \pm 0,02 \text{ uM}$ e $K_i = 0,62 \text{ uM}$). A integração de métodos experimentais e computacionais foi útil no processo de otimização de inibidores inéditos da cruzaina. As relações entre a estrutura e a atividade reveladas nestes estudos são de grande relevância para o desenvolvimento de candidatos a novos fármacos para a terapia da doença de Chagas.

Palavras-chave: Doença de Chagas. Cruzaína. Cinética enzimática.

Referências:

- 1 COURA, J. R.; VIÑAS, P. A. Chagas disease: a new worldwide challenge. **Nature**, v. 465, n. 7301, p. S6-S7, 2010.
- 2 CAZZULO, J. J.; STOKA, V.; TURK, V. The major cysteine proteinase of *Trypanosoma cruzi*: a valid target for chemotherapy of Chagas disease. **Current Pharmaceutical Design**, v. 7, n. 12, p. 1143-1156, 2001.
- 3 SOUZA, M. L. **Identificação de novos inibidores da enzima cruzaína de *Trypanosoma cruzi* candidatos a fármacos contra a doença de Chagas**. 2012. 84p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

PG196

Modular system for non-real-time subsystem management in a Nuclear Magnetic Resonance digital spectrometer

SOUZA, P. V. B. D.¹; COELHO, F. B.¹; PIZETTA, D. C.¹; SILVA, D. M. D. D.¹; MARTINS, M. J.¹; VIDOTO, E. L. G.¹; TANNÚS, A.¹

pedro.victor.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) is a very versatile technique, since it is used to investigate problems in many areas such as biology, chemistry, physics and engineering. The equipment used in NMR are those commercially available which have a number of restrictions to be used in scientific researches. Facing these issues, the Research Group Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética (CIERMag) developed a spectrometer specifically for scientific researches. (1) One of the projects premises is the spectrometer versatility in order that the same equipment can be reconfigured to operate, ideally, in all kinds of NMR experiments. To fulfill this objective, the spectrometer needs a support system capable to manage all experiments peripheral components, and it is the objective of this work. This peripheral system was divided into many modules, each one will manage one set of devices, such as radiofrequency module, bed module and sample module. The element responsible for each module is a Raspberry Pi, which is an ARM processor with graphic processor integrated, mounted on a development board running Raspbian, a specialized Linux version. The Raspberry communicates with the sensors and actuators via SPI interface with Current Loop. Each sensor and actuator will have a data sheet based on the IEEE 1451 standard, whose information will be used in the automatic configuration of the subsystem. A computer terminal, currently employed to develop the NMR experiments methodology, will be utilized to setup the peripheral devices, so it will send the parameters of the experiment to be processed in the Raspberry then resend to the actuators and the measured parameters in the sensors will be send from the Raspberry back to the computer terminal. All software will be developed in Python.

Keywords: Transducer electronic data sheet. Non-real-time subsystem. Nuclear Magnetic Resonance digital spectrometer.

Referências:

1 SILVA, D. M. D. D. et al. Subistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados do Espectrômetro Digital de RM: ToRM Console. **Revista Brasileira de Física Médica**, v. 7, n. 2, p. 35-40, 2013.

PG197

Detecção de radiação infravermelha para diagnóstico de tumores

STRINGASCI, M. D.¹; SALVIO, A. G.²; BAGNATO, V. S.¹; KURACHI, C.¹

mirianstringasci@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

²Fundação Amaral Carvalho

O câncer é responsável por cerca de 13% de todas as causas de morte no mundo. Mais de 7 milhões de pessoas morrem anualmente da doença. (1) Na maioria dos casos, as taxas de sobrevivência são maiores quando diagnosticado em fases iniciais. Sabe-se que as lesões tumorais apresentam uma temperatura diferente se comparado a tecidos normais. (2-3) Neste estudo, foram injetadas subcutaneamente células de tumor de Ehrlich no dorso de nove camundongos Swiss. O crescimento do tumor foi acompanhado, através de imagens de infravermelho, a cada dois dias até que a lesão chegasse a um tamanho de 1cm de diâmetro, afim de monitorar a mudança de temperatura da região durante o crescimento do tumor. Além disso, em parceria com o Departamento de Pele da Fundação Hospital Amaral Carvalho estamos investigando o uso da termografia para discriminação de lesões cutâneas (Carcinoma Basocelular, Carcinoma Espinocelular, Queratose Actínica, Queratose Seborréica Pigmentada, Melanoma e Nevo Intradérmico). Ainda é necessária a elaboração de novo Software para melhor processamento destas imagens. Entretanto, das imagens obtidas até o momento, temos maior facilidade em discriminar o Carcinoma Espinocelular das demais lesões, o que torna este resultado bastante interessante já que existe uma grande dificuldade de diagnóstico desta lesão pela dermatoscopia. Até o momento foi monitorado o tratamento por Terapia Fotodinâmica em 40 lesões de Carcinoma Basocelular a fim de poder prever o resultado da terapia, porém até o presente momento o número de pacientes que não obtiveram sucesso no tratamento é insuficiente para obter quaisquer informações.

Palavras-chave: Termografia. Lesões cutâneas. Terapia fotodinâmica.

Referências:

1. A situação do câncer no Brasil. In: BARBOSA, M. B. A. **A situação do câncer no Brasil: ações da enfermagem para o controle do câncer.** Rio de Janeiro: Ministério da Saúde, 2008. 5-32 p.
2. WOODBURN, K. W.; FAN, Q.; KESSEL, D.; LUO, Y.; YOUNG, S. W. Photodynamic therapy of B16f10 murine melanoma with lutetium texaphyrin. **Journal of Investigative Dermatology**, v. 110, p. 746-751, 1998. doi: 10.1046/j.1523-1747.1998.00182.x.
3. HADDAD, R.; BLUMENFELD, A.; SIEGAL, A.; KAPLAN, O.; COHEN, M.; SKORNICK, Y.; KASHTAN, H. In vitro and in vivo effects of photodynamic therapy on murine malignant melanoma.. **Annals of Surgical Oncology**, v. 5, n. 3, p. 241-247, 1998.

PG198

Síntese de nanopartículas de PLGA contendo curcuminóides para otimização da inativação fotodinâmica de microrganismos

SUZUKI, I.¹; INADA, N.¹; MARANGONI, V.¹; CORRÊA, T.²; ZUCOLOTTI, V.¹; BAGNATO, V.¹

isalsuzuki@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

A disseminação de cepas bacterianas resistentes é ameaça para a saúde pública devido ao uso excessivo de antibióticos. A inativação fotodinâmica de microrganismos é considerada uma alternativa para infecções resistentes. É uma modalidade terapêutica que combina o uso da luz em um comprimento de onda específico, do oxigênio molecular (O₂) e um composto fotossensível, juntos causam a morte de células alvo. A mistura de curcuminóides (curcumina, a curcumina e bis-desmetoxi demetoxycurcumin) é um composto fenólico natural amarelo, extraído do açafrão, *Curcuma longa* Linn, que além de possuir várias ações farmacológicas, pode ser utilizada como fotossensibilizador. No entanto, a mistura de curcuminóides apresenta características hidrofóbicas sendo insolúvel em água, o que resulta em baixa biodisponibilidade. (1) O objetivo deste projeto foi desenvolver nanopartículas de PLGA contendo curcuminóides encapsulados (2) para melhorar sua solubilidade em água, aumentar sua biodisponibilidade e fornecer proteção contra degradação (química e física). As nanopartículas PLGA-curcuminóides foram preparadas por meio do método conhecido como nanoprecipitação ou evaporação de solvente. Foram realizadas duas sínteses diferentes, com a mistura de curcuminóides em pó (síntese 1) e outra com a mistura já diluída em álcool e DMSO (síntese 2), o tamanho das partículas foram cerca de 352 nm (síntese 1) e 236 nm (síntese 2), e a eficiência de encapsulamento aproximadamente 80% e 70%, respectivamente. As nanopartículas retardaram a degradação em relação à luz (azul - 450nm), à temperatura e ao tempo, quando comparadas com a solução de curcuminóides aquosas (livre). Todas as formulações (livre e nanopartículas) foram testadas *in vitro* em *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli* (bactérias Gram positivas e Gram negativas), e em *Candida albicans* (fungo). (3) As formulações foram eficazes em baixas concentrações, porém em concentrações elevadas, a solução de curcuminóides aquosas apresentou toxicidade no escuro, característica não desejada para fotossensibilizador, o que não aconteceu com as nanopartículas. As PLGA-curcuminóides apresentaram liberação controlada do fotossensibilizador, solubilidade em água (sem a necessidade de álcool e DMSO), proteção contra a degradação e foram eficazes na inativação fotodinâmica de bactérias e fungos.

Palavras-chave: Curcuminóides. PLGA. Inativação fotodinâmica.

Referências:

1 YALLAPU, M. M.; GUPTA, B. K.; JAGGI, M.; CHAUHAN, S. C. Fabrication of curcumin encapsulated PLGA nanoparticles for improved therapeutic effects in metastatic cancer cells. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 351, n. 1, p. 19-29, 2010. doi: 10.1016/j.jcis.2010.05.022.

2 KUMARI, A.; YADAV, S. K.; YADAV, S. C. Biodegradable polymeric nanoparticles based drug delivery systemsCurcumin nanoformulations: a review of pharmaceutical properties and preclinical studies and clinical data related to cancer treatment. **Colloids and Surfaces BBiomaterials**, v. 75, p. 1-18, 2010. doi: 10.1016/j.colsurfb.2009.09.001.

3 NAKSURIYA, O.; OKONOGI, S.; SCHIFFELERS, R. M.; HENNINK, W. E. Curcumin nanoformulations: a review of pharmaceutical properties and preclinical studies and clinical data related to cancer treatment. **Biomaterials**, v. 35, p. 3365-3383, 2014. doi: 10.1016/j.biomaterials.2013.12.090.

PG199

Magnetic field driven interminiband charge transfer in InGaAs/InP superlattices

TAVARES, B. G. M.¹; PUSEP, Y. A.¹; TITO, M. A.¹

belarmino@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

The characteristic energies, occupancies and polarizations of the minibands formed by the Γ - Γ and Γ - X_z interlayer electron tunnelings in the InGaAs/InP superlattices are studied in the regime of the integer quantum Hall effect by polarization resolved photoluminescence. Accordingly, the magnetic field induced shrinkage of the interminiband gap, predicted by the theory, and as a consequence, the redistribution of charge over the superlattice minibands and the depolarization of the quantum Hall electron states are observed at odd filling factors. (1-2) The response of the electrons residing in the InGaAs/InP superlattice minibands to the magnetic field is found very similar to the corresponding response of the electrons confined in the symmetric and anti-symmetric two-dimensional minibands of GaAs/AlGaAs double quantum wells. (3) These features are related to the electron with electron interaction and are consequences of the formation of the correlated quantum states like the charge-density and spin-density waves. The presented results are evidence of the formation of the correlated states in multi-component electron systems formed in semiconductor multiple layers at odd filling factors.

Keywords: Superlattice. Quantum Hall effect. Photoluminescence.

Referências:

- 1 SONDHI, S. L.; KARLHEDE, A.; KIVELSON, S. A.; REZAYI, E. H. Skyrmions and the crossover from the integer to fractional quantum Hall effect at small Zeeman energies. **Physical Review B**, v. 47, n. 24, p. 16419-16426, June 1993.
- 2 FERTIG, H. A.; BREY, L.; CÔTÉ, R.; MACDONALD, A. H. Charged spin-texture excitations and the Hartree-Fock approximation in the quantum Hall effect. **Physical Review B**, v. 50, n. 15, p. 11018-11021, Oct. 1994.
- 3 PUSEP, Y. A.; SANTOS, L. F.; GUSEV, G. M.; SMIRNOV, D.; BAKAROV, A. K. Circularly polarized photoluminescence as a probe of density of states in GaAs/AlGaAs quantum hall bilayers. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 4, p. 046802-1-046802-5, July 2012.

PG200

Investigation of the Momentum Distribution of an Excited Bose-Einstein Condensate by Free Expansion

TAVARES, P. E. S.¹; FRITSCH, A. R.¹; VIVANCO, F. A. J.¹; TELLES, G. D.¹; HENN, E. A. L.¹; BAGNATO, V. S.¹

pedro.ernesto.tavares@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Ultracold quantum clouds are the object of regular studies since almost 20 years now. One of the basic tools for revealing their properties is the observation of their atom-density distributions after free expansion that can reveal the conversion of interaction energy to momentum which is used to study quantum turbulence. The reason behind is that turbulence is characterized by a very specific momentum distribution with a defined power-law behavior, known as the Kolmogorov's power law. This behavior has been seen in classical turbulence, quantum turbulence in superfluid liquid Helium and predicted to take place in quantum turbulence in atomic superfluids. The emergence of Quantum Turbulence in a ⁸⁷Rb Bose-Einstein condensate (BEC) (1), has created the necessity to obtain the momentum distribution to investigate the similarities and differences with other turbulent systems. In this work, we have investigated the dynamical behavior of the 2D projected momentum distribution of a BEC (2) subjected to an external excitation and we show that the features observed in the momentum distribution are influenced by the BEC quadrupolar mode. (3) To perform this experiment, we produce a BEC containing 1.2×10^5 atoms in a cigar-shaped harmonic magnetic trap, with trapping frequencies given by $\omega_r = 2\pi \times (188 \text{ Hz})$ and $\omega_x = 2\pi \times (21 \text{ Hz})$. To excite the BEC, a small sinusoidal time-varying anti-Helmholtz magnetic field is superimposed onto the trapping field. The frequency of this excitation is fixed at 189 Hz and the gradient field varies from zero to a maximum value which has been varied from 0.08 up to 0.8 G/cm. The perturbation is left on the trap for 31.7 ms. After the perturbation is switched off, we let the excited atomic gas to evolve inside the trap by a hold time (t_{hold}) up to 40 ms. Finally, we switch off the trapping potential, leaving the cloud in a time-of-flight (TOF) expansion when we make an absorption image of the cloud. The momentum distribution of the BECs are extracted with the same procedure performed in previous work (2). Investigating the dynamical behavior of this momentum distribution, we conclude that it is coupled to the quadrupolar oscillation of the cloud. This effect is demonstrated by showing that the maximum momentum value of the distribution oscillates with a frequency equal to the quadrupolar frequency, and the amplitude of this oscillation grows with the quadrupolar mode amplitude oscillation (3). This observation is a collateral effect of our excitation technique. In order to further study the momentum distribution of quantum turbulence, we must find a way to circumvent these effects, by either changing the analysis method or designing a new experiment. Recently, we are dedicating to generate turbulence with a different method. The idea is to observe the decay of a multi-charged vortex that may collapse in a turbulent regime. To produce this vortex we apply the magnetic phase-imprinting technique, which produces a charge-4 vortex in our sample. The next step is to study the decay of this vortex and find routes to a turbulence regime.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Momentum distribution. Quantum turbulence.

Referências:

- 1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHÃES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 4, p. 045301, 2009. doi: 10.1103/PhysRevLett.103.045301.
- 2 THOMPSON, K. J.; BAGNATO, G. G.; TELLES, G. D.; CARACANHAS, M. A.; SANTOS, F. E. A.; BAGNATO, V. S. Evidence of power law behavior in the momentum distribution of a turbulent trapped Bose-Einstein condensate. **Laser Physics Letter**, v. 11, p. 015501, 2014. doi: 10.1088/1612-2011/11/1/015501.
- 3 BAHRAMI, A.; TAVARES, P. E. S.; FRITSCH, A. R.; TONIN, Y. R.; TELLES, G. D.; BAGNATO, V. S.; HENN, E. A. L.. Investigation of the momentum distribution of an excited BEC by free expansion: coupling with collective modes. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 180, p. 126, 2015. doi: 10.1007/s10909-015-1292-z.

PG201

Estudos estruturais na proteína P21 de *Trypanosoma cruzi*, molécula envolvida no processo de invasão celular

TEIXEIRA, F. B.¹; CRUSCA, E.²; HORJALES, E.¹; MUNTE, C. E.¹

francesco.teixeira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto de Química de Araraquara - UNESP

As formas evolutivas tripomastigota e amastigota extracelular do protozoário *Trypanosoma cruzi*, agente causador da Doença de Chagas, utilizam diferentes mecanismos moleculares os quais provocam a entrada do parasita nas células do hospedeiro. Diversos estudos são conduzidos buscando identificar proteínas envolvidas na invasão celular por tripomastigotas, a principal forma infectiva. A forma amastigota extracelular também capaz de invadir células, de forma que as moléculas envolvidas nesse processo são, ainda, pouco conhecidas ou estudadas. Essas moléculas abrem a possibilidade de um subciclo alternativo de vida do *T. cruzi*, aumentando a capacidade do parasita de se adaptar em condições de alta citotoxicidade propiciadas pelas células hospedeiras. A proteína P21, identificada em 2009 (1), é utilizada por ambas as formas evolutivas e está envolvida no processo de invasão celular, porém seu mecanismo de atuação ainda não pôde ser explicado a nível molecular. Experimentos sugerem que a P21 interage com o receptor de quimiocinas CXCR4 (2), ativando a fagocitose em macrófagos e promovendo a polimerização de actina em tais células. Para iniciar os estudos estruturais da P21, desenvolvemos um protocolo de purificação/reenovelamento. (3) A proteína P21 mostrou-se de fácil obtenção e estável em solução, características ótimas para o estudo com Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Assinalamos os deslocamentos químicos dos átomos da cadeia principal da proteína via espectros de tripla ressonância. Uma predição da estrutura secundária, baseada nos deslocamentos químicos, revelou cinco regiões alfa-helicoidais e a porção N-terminal (resíduos 1-42) desestruturada. Também identificamos várias regiões da proteína com múltiplas conformações, indicando uma grande flexibilidade estrutural. Adicionalmente, conduzimos experimentos de interação entre a P21 e a porção N-terminal do receptor CXCR4, essencial para sua ativação, a fim de avaliar a P21 como um possível alvo para o desenvolvimento de novos fármacos utilizados no tratamento da doença de Chagas.

Palavras-chave: Doença de Chagas. *Trypanosoma cruzi*. Ressonância Magnética Nuclear.

Referências:

- 1 SILVA, C. V. et al. Characterization of a 21kDa protein from *Trypanosoma cruzi* associated with mammalian cell invasion. **Microbes and Infection**, v. 11, n. 5, p. 563-570, 2009.
- 2 RODRIGUES, A. A. et al. A recombinant protein based on *Trypanosoma cruzi* P21 enhances phagocytosis. **Plos One**, v. 7, n. 12, p. e51384-1-e51384-9, 2012.

3 SANTOS, M. A. et al. A successful strategy for the recovering of active P21, an insoluble recombinant protein of *Trypanosoma cruzi*. **Scientific Reports**, v. 4, p. 4529-1-4529-6, 2014. doi: 10.1038/srep04259.

PG202

Síntese e descrição cristalográfica do sal picrato de lamivudina, 3TCH.pic. Modulação das propriedades de estado sólido e farmacêuticas.

TENORIO, J.¹; ELLENA, J.¹

juanct@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Um dos objetivos da engenharia de cristais está relacionado com o aprimoramento de propriedades farmacêuticas de fármacos atualmente comercializados na indústria, mediante a síntese de sais/cocristais. A abordagem desta técnica se baseia na busca por novos *synthons* supramoleculares gerados entre um fármaco e um co-formador (excipiente, por exemplo). Uma vez que a modulação de algumas propriedades físico-químicas dos sais/cocristais é em parte consequência das interações supramoleculares como, por exemplo, a estabilidade ou a solubilidade entre outras. (1) Apresenta-se a análise estrutural mediante difração de raios X de monocristal, de um sal do fármaco lamivudina, 3TC, um dos antirretrovirais da transcriptase reversa mais utilizados e comercializados no mundo inteiro para o tratamento do HIV. Este sal orgânico derivado do ácido pícrico, o picrato de lamivudina (3TCH.pic), é uma nova modificação cristalina do 3TC, o qual cristaliza no grupo espacial ortorrômbico P212121, com um par iônico por unidade assimétrica. Este sal é caracterizado pela formação de um novo *synthon* supramolecular do tipo Dois doadores/Três aceptores (2D/3A), não reportado dentro das estruturas cristalinas conhecidas do fármaco 3TC até agora. (2,3) Este *synthon* apresenta dois centros doadores (Nitrogênios imídico e amínico da citosina) e três centros aceptores (Oxigênios dos grupos fenol e nitro do ácido pícrico) de ligações de hidrogênio. Tanto as implicações da estabilidade e recorrência deste *synthon* supramolecular quanto das demais interações intermoleculares envolvidas no empacotamento cristalino serão discutidas. Também serão apresentados resultados de outras técnicas suplementares para a caracterização de estado sólido desta modificação cristalina (Difração de raios X de pó, Infravermelho, Raman e Microscopia Térmica "Hotstage"). Este estudo visa estabelecer a relação entre a estrutura supramolecular e as propriedades físico-químicas relacionadas com aplicações farmacêuticas, com vistas ao uso desta informação no posterior melhoramento do desempenho do fármaco 3TC.

Palavras-chave: Engenharia de cristais. Synthon supramolecular. Fármaco.

Referências:

- 1 WOUTERS, J.; QUERE, L. **Pharmaceutical salts and co-crystals**. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2011. 406 p.
- 2 TENORIO, J. ; GUIMARAES, F. ; ELLENA, J. ; MARTINS, F. Isostructurality and the conformational role of the 2',3'-moieties in the diversity of lamivudine crystal forms probed in halide salts. **CrystEngComm**, v. 17, n. 28, p. 5187-5194, 2015. doi: 10.1039/C4CE02373K.

3 SILVA, C. C.; CIRQUEIRA, M. L.; MARTINS, F. T. Lamivudine salts with 1,2-dicarboxylic acids: a new and a rare synthon with double pairing motif fine-tuning their solubility. **CrystEngComm**, v. 15, n. 32, p. 6311-6317, 2013. doi: 10.1039/C3CE40844B.

PG203

Whispering gallery mode microresonators for biological sensing

TOMAZIO, N. B.¹; OTUKA, A. J. G.¹; ALMEIDA, G. F. B.¹; MECHÓ, X. R.²; ANDRÉS, M. V.²; MENDONÇA, C. R.¹

nathaliatomazio@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Department of Applied Physics and Electromagnetism - University of Valencia

Whispering Gallery mode optical microresonators have been attracting considerable attention due to their potential to strongly confine light within small dielectric volumes. (1) This exceptional property is quite useful for basic research, such as quantum electrodynamics and nonlinear optics, once it is possible to achieve high intensities by keeping light circulating within these structures. Furthermore, the ease of fabrication, on-chip integration, extreme level of sensitivity and operation at optical and telecommunication frequencies make them suitable for a variety of practical applications, including photonic filters and sensing. (2) In the current work, we demonstrate the fabrication of such resonators via Two-photon polymerization. (3) Using this technique, one can create complex 3D structures with submicrometer feature size. In addition, the flexibility of geometry and the possibility of incorporating a variety of additional material such as organic compounds and metallic nanoparticles make it a powerful tool for microresonator applications. The microstructures we have fabricated are 45 μm outer diameter hollow microcylinders with sidewall roughness estimated in 100 nm. In order to couple light within these microresonators, we participated in the European Project Iphoto-Bio with the University of Valencia to build an experimental setup to implement the coupling. In this setup, light from a 1540 nm-centered broadband source was coupled into the fabricated microresonators via evanescent coupling using a 1.5 μm waist tapered fiber. The transmitted light was then guided to an optical spectral analyzer, where it was possible to measure resonances, represented as attenuation peaks, with free spectral range of about 9.6 nm. In this stage of the project, a similar experimental setup is being assembled in the Photonics group to continue the characterization of the resonance peaks. Such microresonators will subsequently be functionalized with biopolymers in order to be used as sensors for biological applications.

Keywords: Whispering gallery modes. Microresonators. Two-photon polymerization.

Referências:

- 1 RIGHINI, G. C. et al. Whispering gallery mode microresonators: fundamentals and applications. **Rivista del Nuovo Cimento**, v. 34, n. 7, p. 435-488, 2011. doi: 10.1393/ncr/i2011-10067-2.
- 2 FOREMAN, M. R.; SWAIM, J. D.; VOLLMER, F. Whispering gallery mode sensors. **Advances in Optics and Photonics**, v. 7, n. 2, p. 168-240, 2015. doi: 10.1364/AOP.7.000168.
- 3 LAFRATTA, C. N. et al. Multiphoton fabrication. **Angewandte Chemie International Edition**, v.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

46, n. 33, p. 6238-6258, 2007. doi: 10.1002/anie.200603995.

PG204

Study of the activation of PEL polysaccharide biosynthesis in *Pseudomonas aeruginosa* PA14 biofilm formation

TORRES, N. U.¹; SILVA, S. S.¹; MATSUYAMA, B. Y.¹; CHELESKI, J.¹; NICASTRO, G. G.¹; BALDINI, R. L.¹; KRASTEVA, P. V.²; FRONZES, R.²; NAVARRO, M. V. A. S.¹

naiara.utimura@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Instituto Pasteur

Pseudomonas aeruginosa is an opportunistic pathogen capable to adapt and survive on a wide range of different environments. This adaptation ability is frequently associated with the formation of sessile macrocolonies embedded in self-produced matrix, called biofilms. (1) In *Pseudomonas aeruginosa* PA14, the major component of extracellular biofilm matrix is the PEL polysaccharide, a polymer produced by seven proteins of the *pel* operon (PelA-G). (2) The proteins encoded by this gene cluster are predicted to form a transmembrane machinery responsible for the synthesis and translocation of PEL, in a c-di-GMP mediated process. PelD is a inner membrane protein containing a GAF and GGDEF cytosolic domains and is the unique protein coded by *pel* operon containing a c-di-GMP-binding domain. (1,2) Comparison of available crystallographic structures of PelD soluble constructs and the structure obtained by our group reveals a large inter-domain reorganization of PelD in presence of c-di-GMP. (3) This cytoplasmic conformational change could be transmitted to transmembrane domains triggering further structural rearrangements in other members of the Pel complex, activating the biosynthesis of PEL. Concomitantly, the cytoplasmic glycosyltransferase encoded in the operon (PelF) must associate with the c-di-GMP-activated PEL complex in order to initiate the secretion of the polysaccharide. Although some isolated Pel proteins functions have been described, the molecular mechanisms of PEL secretion and the structural organization of the Pel complex remain completely unknown. In order to elucidate the activation mechanism of PelD, we performed an *in vivo* site-directed mutagenesis of *pelD* in *Pseudomonas aeruginosa* PA14. Several amino acids from the hydrophobic inter-domain core of PelD and its S-helix (residues 154 to 176), a helix structurally located between GAF and GGDEF, were mutated to charged ones for further biofilm quantification of those strains. Those mutations aimed to withdraw the S-helix, mimetizing the effect of c-di-GMP-binding, and evaluate the importance of the inter-domain reorganization. Our data reveals that the destabilization of this region leads to mutant strains presenting 25 to 50% less biofilm formation compared to wild type, showing the importance of this hydrophobic core for PelD activated state. Similar effect was seen in C-terminal mutations on the S-helix, while mutations on its N-terminal almost abolish biofilm formation of those strains. Therefore, in conjunction with PelD oligomeric studies, a high dependence of S-helix and c-di-GMP binding on the dimmer formation was observed, leading us to speculate that N-terminal region of S-helix is essential for a probably coiled-coil formation in the dimeric structure. This PelD coiled-coil motif could be responsible for communicating cytoplasmic changes to the following proteins of *pel* operon. Lastly, cross-linking and pull-down assays are being performed to map Pel complex interactions, focusing on the cytoplasm and periplasm portions of the complex. Previous results show that PEL synthesis and inner membrane translocation is done by

an unconventional mechanism, since no interaction could be detected between PelD, PelF and PelG, a putative glycolipid transporter. Thereby, the investigation presented in this work shows the first spotlights in understanding molecular mechanisms of biofilm matrix activation, production and transportation in the pathogen *Pseudomonas aeruginosa*.

Keywords: Biofilm. *Pseudomonas aeruginosa*. c-di-GMP.

Referências:

- 1 FRANKLIN, M. J. et al. Biosynthesis of the *Pseudomonas aeruginosa* extracellular polysaccharides: alginate, Pel, and Psl. **Frontiers in Microbiology**, v. 2, p. 167-1-167-16, 2011. doi: 10.3389/fmicb.2011.00167.
- 2 FRIEDMAN, L.; KOLTER, R. Genes involved in matrix formation in *Pseudomonas aeruginosa* PA14 biofilms. **Molecular Microbiology**, v. 51, n. 3, p. 675-690, 2004.
- 3 WHITNEY, J. C. et al. Structure of the cytoplasmic region of PelD, a degenerate diguanylate cyclase receptor that regulates exopolysaccharide production in *Pseudomonas aeruginosa*. **Journal of Biological Chemistry**, v. 287, n. 28, p. 23582-23593, 2012.

PG205

Obtenção de distribuição de tamanhos de poros em perfilagem por Ressonância Magnética Nuclear

TREVIZAN, W.¹; SOUZA, A.²; HURLIMANN, M.²; BONAGAMBA, T. J.³

williantrevizan@petrobras.com.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP, Cenpes - Petrobrás

²Schlumberger

³Instituto de Física de São Carlos - USP

Técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de baixo campo são usualmente utilizadas pela indústria do petróleo para caracterização in situ de rochas reservatório. (1) Isto se dá pois as taxas de decaimento da magnetização são sensíveis ao ambiente em que os prótons medidos estão inseridos. Desta maneira, os núcleos de Hidrogênio da água e/ou hidrocarbonetos respondem com tempos de relaxação (T1 e T2) maiores ou menores conforme os tamanhos dos poros das rochas. Estas correlações são usadas para estimar propriedades como distribuição de tamanhos de poros e permeabilidade. A correta correspondência entre tempo de relaxação e tamanho de poro se dá pelo conhecimento da relaxatividade superficial, parâmetro que quantifica a interação entre os prótons e as paredes dos poros. Entretanto, não há ainda técnica que permita em poços de petróleo a obtenção deste parâmetro com dados de perfilagem, de modo que há espaço para melhorias na avaliação de formações em termos de permeabilidades e tipos de porosidades dos reservatórios. Neste trabalho, exploramos o estudo da difusão restrita através de medidas de difusividade e T2 por RMN (2), para a obtenção da relaxatividade superficial em condições de poço. O método desenvolvido por meio de simulações que levam em conta parâmetros de rochas reais e características de ferramentas de perfilagem, pode em princípio ser utilizado em aplicações reais de avaliação de formações.

Palavras-chave: Difusão restrita. Relaxatividade superficial. Avaliação de reservatórios.

Referências:

- 1 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. L.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance: petrophysical and logging applications**. Amsterdam: Elsevier Science, 2002. 312 p.
- 2 HURLIMANN, M. D.; VENKATARAMANAN, L.; FLAUM, C.; SPEIER, P.; KARMONIK, C.; FREEDMAN, R.; HEATON, N. Diffusion-editing: new NMR measurement of saturation and pore geometry. In: SPWLA ANNUAL LOGGING SYMPOSIUM, 43., 2002, Oiso. **Proceedings...** Houston: Society of Petrophysicists and Well-Log Analysts - SPWLA, 2002, p. 1-14.

PG206

Espectroscopia de correlação de fluorescência (FCS) aplicada em estudos de sistemas moleculares, biológicos e celulares

TSUTAE, F. M.¹; MOREIRA, H. H. T.¹; ARAÚJO, A. P. U.¹; GUIMARÃES, F. E. G.¹

f.tsutae@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A espectroscopia de correlação de fluorescência (FCS) é uma das diferentes técnicas microscópicas de análise de sistemas moleculares isolados em alta resolução espacial e temporal em concentrações extremamente baixas. Nos últimos anos ela tem sido considerada uma poderosa ferramenta capaz de realizar medidas extremamente sensíveis em áreas como bioquímica e biofísica. (1) Como técnica que possui sensibilidade para detecção de uma única molécula ela é utilizada para medir entre outros: concentrações locais de biomoléculas, coeficientes de difusão e constantes cinéticas moleculares. Ela também pode fornecer informação precisa sobre interações moleculares como as que envolvem antígeno-anticorpo, ácidos nucleicos e proteínas. Através de uma combinação de marcadores fluorescentes de alto rendimento quântico, fontes de luz estáveis (lasers), detecção ultrasensível e microscopia confocal é possível realizar medidas de FCS em volumes da ordem de fentolitros e concentrações de nanomolar, em solução aquosa ou em células vivas. (2) O primeiro objetivo do presente trabalho de doutoramento foi implementar a técnica FCS como ferramenta básica de estudo de processos envolvidos com a dinâmica (difusão) e a interação molecular (concentração/localização). Nesta etapa, implementamos as metodologias necessárias para a utilização da técnica de FCS em um microscópio confocal. Esta preparação inicial envolveu estudos e testes com diferentes marcadores moleculares fluorescentes, determinação de diluições e sua padronização na faixa concentrações entre nano e picomolar. Para se obter determinações qualitativas de processos, foram desenvolvidas metodologias e protocolos que eliminassem alterações indevidas desses cromóforos e sistemas moleculares previamente marcados com outros sistemas, como as interações com paredes dos recipientes e efeitos de armazenagem e acondicionamento de biomateriais, sem que os mesmos alterassem as concentrações e morfologias previamente estabelecidas para a detecção quantitativa do FCS. Estes procedimentos foram de fundamental importância para o estabelecimento de condições que garantissem um estudo sistemático em termos de medidas comparativas e reprodutibilidade, bem como as melhores condições para se obter o melhor sinal de FCS. Como resultado desta primeira etapa, estabelecemos o marcador comercial da família ALEXA 488® como padrão de marcador de biomateriais que possui alta eficiência de emissão e elevados valores da função de correlação. (3) Em um segundo estágio deste trabalho, fizemos estudos preliminares que permitissem obter do FCS variações do coeficiente de difusão molecular a partir da variação de parâmetros como, por exemplo, a viscosidade do meio e a conformação molecular de proteínas. Nessa etapa, utilizamos modelos teóricos que melhor ajustassem à curva experimental medida. A experiência adquirida nessas etapas permitiu o estudo da difusão de proteínas marcadas (PUC II e IV) de um meio aquoso (PBS) para o interior de células.

Palavras-chave: Espectroscopia de correlação de fluorescência. Marcadores fluorescentes. Microscopia confocal.

Referências:

1 KRICHEVSKY, O.; BONNET, G. Fluorescence correlation spectroscopy: the technique and its applications. **Reports on Progress in Physics**, v. 65, n. 2, p. 251-297, 2002.

2 SCHWILLE, P.; HAUSTEIN, E. Fluorescence correlation spectroscopy: novel variations of an established technique. **Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure**, v. 36, p. 151-169, 2007. doi: 10.1146/annurev.biophys.36.040306.132612.

3 HAUSTEIN, E.; SCHWILLE, P. Ultrasensitive investigations of biological systems by fluorescence correlation spectroscopy. **Methods**, v. 29, n. 2, p. 153-166, 2003.

PG207

Teoria quântica de campos a temperatura finita e o efeito Unruh

ULIANA, C.¹; VANZELLA, D.¹

uliana@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Este projeto se destina a explorar o comportamento de uma teoria de campos interagente com quebra espontânea de simetria do ponto de vista de observadores uniformemente acelerados, que atribuem ao campo um estado KMS, ou seja um estado térmico á temperatura finita. Atualmente a restauração da simetria induzida pelo efeito Unruh é controversa, sendo que parte da literatura sustenta que não há transição de fase (1), ao passo que artigos mais recentes suportam o ponto de vista de que não só a transição ocorre como podem haver assinaturas experimentais (2). Fornecemos um argumento de natureza matemática em favor da não restauração de simetria ao mesmo tempo em que notamos que o cerne da controvérsia reside no fato de que parte da literatura utiliza um critério inválido para caracterizar a quebra de simetria, a saber o potencial efetivo do campo, ao contrário do valor esperado do vácuo, desse modo obtendo resultados discordantes.

Palavras-chave: Efeito Unruh. Quebra de Simetria. Estado KMS.

Referências:

1 HILL, C. T. Can the hawking effect thaw a broken symmetry?. **Physics Letters B**, v. 155, n. 5-6, p. 343-346, 1985.

2 CASTORINA, P.; FINOCCHIARO, M. Symmetry restoration by acceleration. **Journal of Modern Physics**, v. 3, n. 11, p. 1703-1708, 2012.

PG208

Computação quântica adiabática usando qubits supercondutores

VARGAS-GRAJALES, J. A.¹; BRITO, F.¹

juanvagra@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

A computação quântica adiabática tem como base fundamental o teorema adiabático (1), cuja eficiência e tempo de processamento de informação depende do comportamento do gap mínimo, que tende diminuir quando se aumenta os recursos (bits quânticos: qubits), a fim de melhorar o poder computacional. Por outro lado, os qubits físicos com um potencial promissor na computação quântica adiabática são os qubits supercondutores. (2) No entanto, quando são fabricados e implementados estes circuitos supercondutores surgem vários problemas devido a erros de manipulação. (3) Portanto, nós consideramos uma cadeia de Ising com desordem para modelar um conjunto de qubits supercondutores de fluxo com estas imprecisões, e assim explorar a relação entre a probabilidade de obter o estado final desejado sob uma evolução adiabática com esses erros. Nós encontramos que a repetição de nosso algoritmo adiabático permite a correção dos erros experimentais, em outras palavras, a redundância de informação reduz a probabilidade de encontrar uma solução errada do algoritmo usado.

Palavras-chave: Teorema adiabático. Qubits supercondutores. Correção de erros quânticos.

Referências:

1 FARHI, E. et al. Quantum computation by adiabatic evolution. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/quant-ph/0001106>>. Acesso em: 12 ago 2015.

2 CLARKE, J.; WILHELM, F. K. Superconducting quantum bits. **Nature**, v. 453, p. 1031, 2008. doi: 10.1038/nature07128.

3 DONG, D. et al. Robust manipulation of superconducting qubits in the presence of fluctuations. **Scientific Report**, v. 5, n. 7873, p. 1, 2015. doi: 10.1038/srep07873.

PG209

Rota para investigar a evolução dinâmica de vórtices multi-carregados em superfluidos atômicos

VIVANCO, F. A. J.¹; TAVARES, P. E. S.¹; FRITSCH, A. R.¹; TELLES, G. D.¹; HENN, E. A. de L.¹; BAGNATO, V. S.¹

franklinze@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Vórtices em condensados gasosos de átomos alcalinos tem sido criados experimentalmente empregando diversos métodos, sendo um dos mais interessantes o método de impressão de fase topológica o qual é capaz de produzir vórtices com carga múltipla. (1) Vórtices multi-carregados são energeticamente instáveis, por isso é esperado que se dividam em vários vórtices de carga unitária. Temos produzido condensados de Bose-Einstein contendo 1.2×10^5 átomos de ^{87}Rb ($F = 2, m_F = 2$) em um potencial magnético harmônico em *Quadrupole-Ioffe Configuration* (QUIC) e imprimimos um vórtice quantizado de carga 4 usando fases topológicas através da inversão adiabática do *bias* do campo magnético com o uso de bobinas externas, as mesmas usadas para produzirmos turbulência quântica no passado. (2) Para explorar a evolução deste vórtice seguramos a nuvem na armadilha com o *bias* invertido por um tempo que chamamos de *hold time*, para depois liberarmos em tempo de voo (TOF) e fazermos o diagnóstico através de imagem de absorção. Porém, para *hold time* maior que 10 ms a nuvem fica muito diluída o que dificulta a observação do decaimento. Para segurarmos a nuvem com o vórtice por um *hold time* maior, implementamos uma Armadilha Óptica (OT). Um efeito interessante acontece quando, para certas configurações da OT, a nuvem é comprimida e a linha de vórtice muda de direção. Na configuração atual de nosso experimento, a pesar de termos a OT junto com a QUIC, não é possível evitar a expansão da nuvem ou a compressão da mesma, sendo necessário otimizar o acoplamento espacial entre estas armadilhas. Com o intuito de contornar este problema implementamos o chamado *Time Averaged Potential* (TAP). (3) técnica que consiste em mudar a cintura efetiva do feixe da OT e assim ter um confinamento sintonizável e flexível para obtermos uma configuração que seja capaz de segurar a nuvem com o vórtice multi-carregado sem alterar a configuração do mesmo.

Palavras-chave: Vórtices quânticos. Superfluidos. Condensados de Bose-Einstein.

Referências:

- 1 LEANHARDT, A. E. et al. Imprinting vortices in Bose-Einstein condensate using topological phases. **Physical Review Letters**, v. 89, n. 19, p. 190403-1, 2002. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.190403>.
- 2 HENN, E. A. L. et al.. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 103, p. 045301, 2009. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.045301>.
- 3 AIKAWA, K. et al. Bose-Einstein condensation of Erbium. **Physical Review Letters**, v. 109, p.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

210401, 2012. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.210401>.

PG210

Detection of citrus canker and huanglongbing using fluorescence imaging spectroscopy (FIS) technique

WETTERICH, C. B.¹; NEVES, R. F. O.¹; MARCASSA, L. G.¹

caiovtrich@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

In recent years, there has been an increasing in the interest of early detection of citrus diseases to prevent great economic losses due contamination of new plants. There are two major citrus diseases: citrus canker (*Xanthomonas axonopodis* pv. *citri*) and Huanglongbing (HLB, *Candidatus Liberibacter asiaticus*). Both are a serious threat to citrus production worldwide including regions in Brazil and USA. Some nutritional deficiencies such as iron and zinc have visual symptoms similar to HLB, while the citrus canker can be confused with the scab and citrus leprosis and may lead to incorrect diagnosis. The whole process to confirm the diseases is time consuming and expensive. So, there is a demand for a fast, sensible, and selective method for the rapid detection of citrus diseases. One of these techniques, fluorescence imaging spectroscopy (FIS) has been investigated as a tool in plant studies. The FIS has a potential to obtain spatial and spectral information than regular imaging techniques, and the most important aspect is that the technique is nondestructive and nonintrusive to the plant physiology. The acquisition of the images is just the first step in the whole process; the next step is to discriminate the diseased samples with similar visual symptoms by using image analysis techniques. The information contained in multispectral images allows the characterization, identification and classification of the diseased samples. The computational methods, support vector machine (SVM) and neural networks, have been successfully used for the classification of multispectral remote sensing images. (1-3) In this work, we will present the development and evaluation of the FIS system with SVM and neural network classifiers to detect citrus diseases. We applied the FIS system with these computational methods to discriminate between citrus canker and citrus scab, and also have applied it to discriminate HLB from zinc deficiency. The classification results indicated that this technique presents a high accuracy when compared either samples with citrus canker and citrus scab using the neural network method, or samples with HLB and zinc deficiency using the SVM classifier. Furthermore, the sensitivity and specificity obtained for each group is also high. Such results show that it is possible to discriminate citrus diseases that present similar symptoms.

Keywords: Citrus diseases. Fluorescence images. Image analysis.

Referências:

1 WETTERICH, C. B.; KUMAR, R.; SANKARAN, S.; BELASQUE JUNIOR, J.; EHSANI, R.; MARCASSA, L. G. A comparative study on application of computer vision and fluorescence imaging spectroscopy for detection of huanglongbing citrus disease in the USA and Brazil. **Journal of Spectroscopy**, v. 2013, p. 841738-1-841738-6, 2013. doi: 10.1155/2013/841738.

2 NAIDU, R. A.; PERRY, E. M.; PIERCE, F. J.; MEKURIA, T. The potential of spectral reflectance

technique for the detection of Grapevine leafroll-associated virus-3 in two red-berried wine grape cultivars. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 66, n. 1, p. 38-45, 2009.

3 PYDIPATI, R.; BURKS, T. F.; LEE, W. S. Statistical and neural network classifiers for citrus disease detection using machine vision. **Transactions of the ASAE**, v. 48, n. 5, p. 2007-2014, 2005.

PG211

Density functional theory approach to the single electron transistor

ZAWADZKI, K.¹; OLIVEIRA, L. N.¹

krissia.zawadzki@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Density Functional Theory (DFT) has provided an easy way to study solid state systems and molecules. Based on the Hohenberg-Kohn theorem, which states that the ground state Ψ_{GS} is an unique functional $F[\rho]$ of density $\rho(\vec{r})$, DFT simplifies the task of calculating the structure and the properties of physical systems by seeking ρ instead of directly solving the full Ψ_{GS} from the Schrodinger equation. (1) Although DFT approaches have attempted to extend its formalism to strong correlated systems, most approximations are limited, whereas constructing exact functionals remains challenging. Recent proposals involving new concepts and theorems - namely, the adiabatic connection, quantum metric spaces, entanglement and renormalization-group transformations applied to model Hamiltonians - open a promising opportunity to deal with interacting problems. More specifically, our work attempts to combine the adiabatic connection and renormalization-group approaches and apply them to the single-electron transistor (SET), an elementary nanodevice constituted by a quantum dot bridged by two 2-dimensional electron gases, whose electronic occupation number can be controlled by an external gate potential V_G . In the adiabatic connection scheme, we will work on the Hamiltonian of the SET, which is well described by the Anderson model, to define the functional $E[\rho]_\lambda = T_s[\rho] + V_s[\rho] + \int_0^1 d\lambda \langle \Psi_\lambda | U | \Psi_\lambda \rangle$, with T_s and V_s being, respectively, the kinetic and external potential energies in the Kohn-Sham system and $U_\lambda = \lambda U$ representing the scaled Coulomb repulsion. Within this construction, $\lambda \in [0, 1]$ is a parameter adjusting the strenght of U , so that its possible to continously move from the interacting to the non-interacting regimes since the external potential is choosen to keep ρ fixed. (2) In order to analyse this transition in a given scale of energy, we appeal to the renormalization group (RG) technique, which allows us to solve H through an iterative procedure by a transformation $\tau[H_N] = H_{N+1}$. (3) Therefore, our goal is to develop a sequence of transformed Hamiltonians $H_0, H_1, \dots, H_N$ in terms of the expected value $\langle U \rangle_\lambda$ and λ . In practice, we will attempt to determine an approximate expression for the energy functional $E[\rho]$ for the SET. To test this procedure, we will determine the zero-temperature conductance of the device as a function of V_G and compare the result with experimental data. This step completed, we will consider a more realistic description of the SET, one in which a tight (wide) square well will replace the single level representing the quantum dot (each electron gas) in the Anderson model.

Keywords: Density functional theory. Adiabatic connection. Single electron transistor.

Referências:

1 DREIZLER, R. M.; GROSS, E. K. U. **Density functional theory:** an approach to the quantum many-body problem. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2012. 304 p.

2 SAVIN, A.; COLONNA, F.; POLLET, R. Adiabatic connection approach to density functional theory of electronic systems. **International Journal of Quantum Chemistry**, v. 93, n. 3, p. 166-190, 2003. doi: 10.1002/qua.10551.

3 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-group approach to the problem of conduction through a nanostructure. **Physical Review B**, v. 68, n. 3, p. 035337, 2003. doi: 10.1103/PhysRevB.68.035337.



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Índice de Autores



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP



SIFSC 5, 28 de setembro a 02 de outubro 2015, São Carlos-SP

Patrocínio

THORLABS



Q u a n t u m D e s i g n

América do Sul



Apoio



**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**

Instituto de Física de São Carlos



CENTRO DE PESQUISAS EM ÓPTICA E FOTÔNICA

SIFSC.IFSC.USP.BR