

# SIFSC<sup>6</sup>

SEMANA INTEGRADA DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

**LIVRO DE RESUMOS**



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

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

**Livro de Resumos**

**São Carlos  
2016**

## **Universidade de São Paulo**

Reitor Marco Antonio Zago  
Vice-Reitor Vahan Agopyan

## **Instituto de Física de São Carlos**

Diretor Tito José Bonagamba  
Vice-Diretor Richard Charles Garratt

## **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  
(6.: 03 out. – 07 out.: 2016: São Carlos, SP.)

Livro de resumos/ Organizado por Vinicius H. A.  
Aurichio [et al]. São Carlos: IFSC, 2016.  
397p.

Texto em português.

1. Física. I. Aurichio, V. H. A. II. Morazotti, N. A. C.  
III. Título.

ISBN 978-85-61958-16-9

CDD 530



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

# Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

*SIFSC 6*

## Coordenadores

Prof. Dr. Tito José Bonagamba

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

Prof. Dr. Valmor Roberto Mastelaro

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

Anacleto Silva de Souza

Angélica Carrillo Silva

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Guilherme Arantes Canella

Humberto Ribeiro de Souza

Nícolas Morazotti

Vicente Silva Mattos

Vinicius Henrique Aurichio



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP



# Carta de apresentação

Mais um ano se passa e alunos dos diversos cursos do instituto, com apoio da diretoria e sua ampla e qualificada equipe, organizaram a Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos (SIFSC). Em sua sexta edição, a SIFSC continua a promover atividades acadêmicas e culturais com o objetivo de integrar sua diversa comunidade. Fazemos isso por meio de palestras de docentes, palestras de empresas, promovendo reflexões sobre os cursos em mesas redondas, e disponibilizando estrutura para que todos possam mostrar suas habilidades artísticas.

Desde a SIFSC I, em 2011, o Workshop da pós-graduação foi incorporado ao evento. Alunos de pós-graduação apresentam seus trabalhos para serem avaliados por docentes e pós-doutorandos credenciados a fim de acompanhar sua evolução no projeto. Também desde 2011, abre-se o espaço para receber os trabalhos de alunos de Iniciação Científica que desejem mostrar seus trabalhos. Mais recentemente, a partir de 2014, mais um evento foi incluído na SIFSC: o SIICUSP. As apresentações da fase local do Simpósio Internacional de Iniciação Científica e Tecnológica da USP no IFSC ocorrem dentro da programação da Semana da Física, ampliando ainda mais o alcance dos trabalhos apresentados. Este ano, introduziu-se um novo elemento: as apresentações de trabalhos serão todas orais, estimulando os alunos a se adequarem aos formatos encontrados em congressos, onde terão que mostrar seus projetos de forma sucinta, dentro de um tempo limitado.

O evento é também uma vitrine para empresas da área tecnológica. Essas empresas podem buscar parceiros dentro do instituto, assim como atrair alunos capacitados para trabalhar nelas. Contribuímos assim para esta saudável relação entre a universidade e as empresas, já tão presente nas parcerias de nosso instituto com a iniciativa privada.

Como forma de dar destaque a alguns trabalhos, criou-se o Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, em homenagem à fundadora do IFSC. Após selecionados, os trabalhos são apresentados para uma banca com especialistas de todas as grandes áreas representadas no instituto e os melhor avaliados recebem o prêmio em reconhecimento.

A Comissão Organizadora agradece a todo o apoio dado pela diretoria do IFSC-USP, da Comissão de Graduação e da Comissão de Pós-Graduação. Agradecemos também aos palestrantes e avaliadores, sem os quais o evento não seria possível. Agradecemos à presença de todos os participantes que prestigiam nosso evento. Oferecemos ainda um agradecimento especial às bibliotecárias do instituto que dedicam muito tempo e esforço na padronização e adequação deste livro de resumos.

*Comissão Organizadora da SIFSC 6*



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP



# Lista de resumos

## Workshop de Iniciação Científica

<b>IC1 - Estados ligados quark antiquark e correções de alfa s no potencial</b> ANJOS, C. F.; BOITO, D. ....	31
<b>IC2 - Avaliação da interação entre a proteína CrNIP7 de Chlamydomonas reinhardtii com potenciais proteínas parceiras</b> BARRA, A. L. C.; GUTIERREZ, R. F.; ARAÚJO, A. P. U.....	33
<b>IC3 - Melhoria na percepção teórico-experimental de visitantes do Museu Professor Mário Tolentino</b> BORGES, M. C. T.; YOSHIOKA, A. K.; MASCARENHAS, Y. P. ....	35
<b>IC4 - Introduction to the electroweak theory</b> BOTELHO JUNIOR, M. V.; CUCCHIERI, A. ....	37
<b>IC5 - Enhancement and optical characterization of a fluorescence microendoscope adapted to smartphone</b> BROGNARA, G.; KURACHI, C.....	38
<b>IC6 - Effect of the primary cosmic ray flux on the secondary positron flux</b> BUENO, E. F.; VECCHI, M.; CAROFF, S.; BOUDAUD, M.....	39
<b>IC7 - Accurate determination of the nuclear quadrupole moment of xenon from the molecular method</b> CANELLA, G. A.; SANTIAGO, R. T.; HAIDUKE, R. L. A.....	40
<b>IC8 - Uso da TIC nos anos finais do Ensino Fundamental: oito anos de trajetória e parceria</b> NAVASCUES, F. F.; BORTOLETTO-SANTOS, R. C.; COLNAGO, N. A.; MASCARENHAS, Y. P.	41
<b>IC9 - Manipulação de campos magnéticos em sistemas de átomos frios e condensados de Bose-Einstein</b> DIAS, P. G. S.; HENN, E. A. L.....	43
<b>IC10 - The ontology of Faraday's lines of force: a historical analysis</b> FERREIRA, C. T. T.; SILVA, C. C.....	44

<b>IC11 - Microlites Structure Refinement</b> GARCIA, G. S.; ANDRADE, M. B.; ELLENA, J. ....	45
<b>IC12 - Lacase: caracterização, estudos estruturais e funcionais</b> GREJO, M. P.; MUNIZ, J. R. C. ....	47
<b>IC13 - Characterization and control system of a magnetic field for tuning the Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate</b> MAZO, P. L.; FARIAS, K. M.; GUTIERREZ, E. M.; BAGNATO, V. S.; CASTILHO, P. C. M.; DIAS, P. G. S.; PEÑAFIEL, E. E. P. ....	48
<b>IC14 - Planejamento racional, síntese supramolecular e caracterização de novas formulações sólidas de fármacos utilizados no tratamento de doenças negligenciadas</b> MEDINA, A. C. Q. D.; CARVALHO JUNIOR, P. S.; ELLENA, J. A. ....	49
<b>IC15 - The light automated measurement strategy at a plant controlled growth chamber</b> MERENDA, J. V. B. S.; ALMEIDA FILHO, H. A.; BRUNO, O. M. ....	50
<b>IC16 - Caracterização de uma hidrolase de glicosídeo (XCC3535) de Xanthomonas campestris</b> NAKADA, P. J. T.; TOMAZINI JÚNIOR, A.; POLIKARPOV, I. ....	51
<b>IC17 - Study about the possibility of indirect detection of dark matter</b> NAKASHIMA, D. K.; SOUZA, V. ....	53
<b>IC18 - Expressão, purificação e caracterização de atividade hidrolítica de hidrolase de glicosídeo</b> ROCHA, T. S.; MERA, A. E. M.; LIMA, M. Z. T.; MUNIZ, J. R. C. ....	55
<b>IC19 - Study of organic molecules (perylene) for applications in laser-active medium</b> SCIUTI, L. F.; DE BONI, L. ....	57
<b>IC20 - Caracterização dos agrupamentos neurais da amígdala envolvidos na reinstalação induzida por contexto da autoadministração de etanol por ratos</b> TAVARES, L. C.; LEAO, R. M.; BIANCHI, P.; PALOMBO, P.; PLANETA, C. da S. ....	58
<b>IC21 - Montagem de um laser diodo de cavidade estendida e sintonizável em configuração Littrow</b> TODÃO, F. R.; COURTEILLE, P. W. ....	60
<b>IC22 - Uma nova proposta para visualização e discussão do experimento de ondas sonoras em tubos</b> WANDERLEY, A. B.; PIZETTA, D. C.; PAIVA, F. F.; MASTELARO, V. R. ....	62



## Workshop da Pós-Graduação

<b>PG1 - Co-occurrence networks for text authorship identification</b> AKIMUSHKIN, C.; AMANCIO, D.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ....	63
<b>PG2 - A hierarchical model of the metabolic machinery based on the kcore decomposition of plant metabolic networks.</b> ALMEIDA FILHO, H. A.; BRUNO, O. M. ....	64
<b>PG3 - Gorilla Glass under femtosecond laser pulses: micromachining, waveguide fabrication and nonlinear properties</b> ALMEIDA, G. F. B.; ALMEIDA, J. M. P.; MARTINS, R. J.; DE BONI, L.; MENDONÇA, C. R. ....	65
<b>PG4 - Structural and functional studies of cellulosomal thermophilic glycoside hydrolases involved on lignocellulosic biomass hydrolysis</b> ALMEIDA, L. R.; MUNIZ, J. R. C.; SILVA, W. J. G. ....	66
<b>PG5 - Ambientes radioativos naturais como fontes de desequilíbrio químico local e suas potenciais implicações prebióticas</b> ALTAIR, T.; GALANTE, D. ....	67
<b>PG6 - Estudo do recobrimento biológico de nanossuperfícies por modelagem computacional: aplicação no desenvolvimento de imunonanosensores</b> AMARANTE, A. M.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; FREITAS, L. C. G.; FRANCA, E. F.; OLIVEIRA, G. S.; IERICH, J. C. M.; MORAES, A. S.; LEITE, F. L. ....	68
<b>PG7 - Study of performance of bulk heterojunction solar cells by using numerical and analytical modeling</b> AMORIM, D. R. B.; FARIA, R. M. ....	70
<b>PG8 - Desenvolvimento de redes proteicas bidimensionais automontáveis</b> ANDRADE, G. B.; SERRÃO, V. H. B.; NAVARRO, M. V. A. S. ....	71
<b>PG9 - Topological study of porous media through <math>\mu</math>CT imaging and complex networks</b> ANDREETA, M. B.; POLLI, S.; OLIVEIRA, E. L.; RODRIGUES, F. A.; BONAGAMBA, T. J. ....	73



<b>PG10 - Holographic p- and d-wave superconductors with backreaction and away from the large N limit</b> APRILE, N. P.; HARTMANN, B. ....	75
<b>PG11 - Estudos das relações entre estrutura e função de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios: em busca de enzimas mais eficientes na despolimerização de biomassa lignocelulósica</b> ARAÚJO, E. A.; POLIKARPOV, I. ....	76
<b>PG12 - Fabricação, caracterização e estudo de degradação por oxigênio de células solares orgânicas</b> ARAÚJO, F. L.; FARIA, R. M. ....	78
<b>PG13 - Developments in evolutionary games of indirect reciprocity</b> ARAUJO, G. D.; MAIA, L. P. ....	79
<b>PG14 - Estudo da purificação e caracterização de biossurfactantes produzidos por linhagens bacterianas isoladas a partir de rocha de reservatório de petróleo</b> ARGENTIN, M. N.; BOSSOLAN, N. R. S. ....	81
<b>PG15 - Development of an immersed interface method for the 2D Navier-Stokes equations</b> AURICHIO, V. H.; CUCCHIERI, A.; OLIVEIRA, M. L. B. ....	83
<b>PG16 - Estudos estruturais e funcionais das proteína TarA envolvida na síntese da parede de ácidos teicóicos em <i>Staphylococcus aureus</i></b> AZEVEDO, E. C. de; NASCIMENTO, A. S. ....	84
<b>PG17 - Otimização de modularidade baseada em caminhadas auto-excludentes</b> RONQUI, J. R. F.; TRAVIESO, G.; BAGNATO, G. G. ....	86
<b>PG18 - Studies of THG at interfaces of different optical materials with ultrashort laser pulses: the influence of self-focusing effect</b> BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. ....	88
<b>PG19 - Metrologia quântica com medida de tempo finito</b> BARRETO, D. L.; SOARES-PINTO, D. O. ....	90
<b>PG20 - Efeito da adição de dopantes e da rota de síntese nas propriedades do composto <math>\text{CaTiO}_3</math></b> BARROS, K. L. P. de; MASTELARO, V. R. ....	91
<b>PG21 - g-factors, effective mass and structural parameters in III-V semiconductors from hybrid-density functional theory</b> BASTOS, C. M. O.; SABINO, F. P.; SILVA, J. L. F.; SIPAHI, G. M. ....	92



<b>PG22 - Abordagem histórico-investigativa em atividades experimentais: limites e obstáculos dentro da sala de aula</b> BATISTA, R. F. M.; SILVA, C. C. ....	93
<b>PG23 - A comparative study of two selenophosphate synthetase (SPS2) isoforms in Naegleria gruberi focusing on selenium metabolism</b> BELLINI, N. K.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H. ....	94
<b>PG24 - Algoritmo de reconhecimento de padrões em eventos do observatório Pierre Auger</b> BENATTI, A.; SOUZA, V. ....	96
<b>PG25 - Density functional theory study of the role of the alkali and chalcogen atoms on the stability of quaternary chalcogenides <math>A_2M^{II}M_3^{IV}Q_8</math></b> BESSE, R.; DA SILVA, J. L. F. ....	97
<b>PG26 - Caracterização funcional da proteína spliceossomal CRN e de suas interações em Trypanosoma brucei.</b> BORALLI, C. M. S.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H. ....	98
<b>PG27 - Paper-based biosensor for the quantification of blood biomarkers for Alzheimers disease</b> BRAZACA, L. C.; ZUCOLOTTI, V. ....	100
<b>PG28 - Quantum thermal machines</b> CHERUBIM, C. F.; BRITO, F. ....	101
<b>PG29 - Análise e melhoria de um sistema de aquisição de pressão intracraniana não invasiva wireless</b> BRUNELLI, R.; ANDRADE, R. A. P.; MASCARENHAS, S. ....	102
<b>PG30 - Caracterização estrutural da enzima FOLD de Xanthomonas albilineans: alvo molecular para triagem de compostos bioativos inibidores da biossíntese de folatos</b> BUENO, R. V.; GUIDO, R. V. C. ....	104
<b>PG31 - Estudo da inativação fotodinâmica pela incorporação de fotossensibilizador induzido em microrganismos</b> CAFACE, R. A.; GUIMARÃES, F. E. G. ....	106
<b>PG32 - Estudos e desenvolvimento de métodos baseados em harmônicos esféricos para análise de similaridade estrutural entre ligantes</b> CAIRES, F. R.; MONTALVÃO, R. W. ....	107



<b>PG33 - Clonagem, expressão heteróloga e caracterização de enzima arabinofuranosidase de <i>Thielavia terrestris</i> envolvida na degradação da biomassa lignocelulósica</b> CAMARGO, S.; MUNIZ, J. R. C.....	109
<b>PG34 - Investigation of photodynamic therapy in three-dimensional culture of breast cancer</b> CAMPOS, C. P.; INADA, N.; KURACHI, C.....	110
<b>PG35 - Spin-orbit coupling effects in nanowires using multiband <math>k \cdot p</math> method</b> CAMPOS, T.; FARIA JUNIOR, P. E.; GMITRA, M.; SIPAHI, G. M.; FABIAN, J.....	112
<b>PG36 - Edge states appearance in non-topological cylindrical quantum dots</b> CANDIDO, D. R.; EGUES, J. C.....	113
<b>PG37 - Expansão perturbativa de QCD na rede</b> CARVALHO, L. F.; MENDES, T.; CUCCHIERI, A. ....	114
<b>PG38 - Neuronal avalanches as signatures for hippocampal in vivo recordings and their simulations</b> CARVALHO, M. M.; FUKAI, T.; MAIA, L. P. ....	116
<b>PG39 - Experimental production of a Bose-Einstein condensate of sodium atoms</b> CASTILHO, P. C. M.; PEDROZO-PEÑAFIEL, E.; MERCADO-GUTIERREZ, E. D.; FARIAS, K. M.; BAGNATO, V. S. ....	117
<b>PG40 - On the structural characteristics of some transcriptional regulators complexed to DNA and the conformational changes this binding requires.</b> CÂMARA, A. S.; HORJALES REBOREDO, E. ....	118
<b>PG41 - Simulações ambientais e caracterização espectroscópica in-situ de potenciais bioassinaturas moleculares para aplicação em missões espaciais</b> CERINI, M. F.; RIVAS, N.; GALANTE, D.....	120
<b>PG42 - Polaron e formação de pares via interação por fônons em misturas atômicas em dimensão mista</b> CHAVIGURI, R. H.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.....	121
<b>PG43 - Controlled polarization of two-dimensional quantum turbulence in atomic Bose-Einstein condensates</b> CIDRIM, A.; SANTOS, F. E. A. dos; GALANTUCCI, L.; BAGNATO, V. S.; BARENGHI, C. F. ....	122
<b>PG44 - Functional studies of septin of <i>Chlamydomonas reinhardtii</i></b> CIOL, H.; PINTO, A. P. A.; MACEDO, J. N. A.; ZERAIK, A. E.; ARAÚJO, A. P. U.....	123



<b>PG45 - Mechanism of the Phthalocyanines photochemical reactions depending on the substituent and geometry</b> COCCA, L. H. Z.; DE BONI, L.; GOTARDO, F. ....	124
<b>PG46 - Síntese e caracterização dos compostos SrTi<sub>1-x</sub>Cu<sub>x</sub>O<sub>3</sub>, Cu/SrTiO<sub>3</sub> e Ni/SrTiO<sub>3</sub> aplicados à catálise da reação de deslocamento gás-água</b> COLETTA, V. C.; MARCOS, F. C. F.; NOGUEIRA, F. G. E.; BERNARDI, M. I. B.; ASSAF, E. M.; GONÇALVES, R. V.; MICHALOWICZ, A.; MASTELARO, V. R. ....	126
<b>PG47 - Organic bioelectronics: from materials characterization to devices development</b> COLUCCI, R.; FARIA, G. C. ....	128
<b>PG48 - Desenvolvimento de imagens paralelas utilizando bobinas phased array e sample arrayed</b> CONSALTER, D.; TANNUS, A.; VIDOTO, E.; PAPOTI, D.; MARASSI, A. ....	130
<b>PG49 - Biosensors based on immobilized folic acid molecules for cancer cells detection</b> CORREIA, A. R.; VIEIRA, N. C. S.; ZUCOLOTTO, V. ....	131
<b>PG50 - Non-Markovian quantum dynamics induced by injection of classical colored noise</b> COSTA FILHO, J. I. da; PINTO, D. de O. S. ....	132
<b>PG51 - Biossurfactantes produzidos por linhagens bacterianas isoladas de reservatório de petróleo: produção e avaliação das propriedades tensoativas</b> COSTA, G. C.; BOSSOLAN, N. R. S. ....	133
<b>PG52 - An open source software for MRI-based liver fat quantification</b> COSTA, Y. A.; PAIVA, F. F.; RODRIGUES, E. L. L. ....	135
<b>PG53 - Nonlinear microscopy by elliptical polarization rotation</b> COURA, J. A. G.; BARBANO, E. C.; MIGUEZ, M. L.; MISOGUTI, L. ....	137
<b>PG54 - Técnicas de análise de caracterização aplicadas à hematitas</b> CRUZ, C. G. C.; ANDRADE, M. B.; GARCIA, G. S. ....	138
<b>PG55 - Crescimento, estrutura e dinâmica molecular dos cristais do polímero poly(3-(ethylhexyl)thiophene) (P3EHT)</b> CUNHA, G. P.; AZEVÊDO, E. R.; FARIA, G. C.; DUONG, D. T.; SALLEO, A. ....	139
<b>PG56 - Formation of ultracold molecules using a high power fiber laser</b> DA SILVA, P. C. V.; PASSAGEM, H. F.; RODRÍGUEZ, R. C.; MARCASSA, L. G. ....	140
<b>PG57 - Dinâmica de medidas quânticas e erros</b> DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J. ....	142



<b>PG58 - Crystallographic studies of ElrR, an Enterococcus faecalis transcriptional regulator, and DNA binding site interaction parameters</b> DE GROOTE, M. C. R.; CAMARGO, I.; REPOILA, F.; SERROR, P.; HORJALES, E. ....	144
<b>PG59 - Avaliação da acurácia do modelo de carbono em solos- CQESTR- em sistemas agrícolas brasileiros</b> DEVAI MORAES, R. R.; VILLAS BOAS, P. R. ....	145
<b>PG60 - Salt development of a more soluble multi-component drug form: Ethionamide nitrate</b> DINIZ, L. F.; ELLENA, J. ....	147
<b>PG61 - Two-photon absorption spectrum of fluorenone-based molecules</b> DIPOLD, J.; BATISTA, R. J. M. B.; FONSECA, R. D.; SILVA, D. L.; SIMAS, A. M.; DE BONI, L.; MENDONÇA, C. R. ....	149
<b>PG62 - Superradiant propagation of correlations in a cloud of two-level atoms</b> ESPIRITO SANTO, T. S.; BACHELARD, R. P. M.....	150
<b>PG63 - Topological stability and textual differentiation in human interaction networks</b> FABBRI, R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.....	151
<b>PG64 - Threshold dose distribution and its causes and consequences in photodynamic therapy</b> FARIA, C. M. G.; INADA, N. M.; BAGNATO, V. S.....	152
<b>PG65 - Biossensor eletroquímico para análise de ácidos nucleicos do vírus da dengue</b> FARIA, H. A. M.; ZUCOLOTTO, V. ....	154
<b>PG66 - A ratiometric luminescent thermometer based on thermally coupled states of rare-earth elements</b> FARIA, W. J. G. J.; NUNES, L. A. O. ....	155
<b>PG67 - Estudos estruturais e biológicos da proteína MEG-27 de S. mansoni</b> FELIZATTI, A. P.; ZERAIK, A. E.; DEMARCO, R.....	156
<b>PG68 - The tRNASec specific interaction of Escherichia coli Selenocysteine Elongation Factor (SelB) and Seryl-tRNA Synthetase (SerRS)</b> FERNANDES, A. F.; SERRÃO, V. H. B.; SCORTECCI, J. F.; BASSO, L. G. M.; THIEMANN, O. H.....	158
<b>PG69 - Um modelo de execução dirigido pelos dados em processadores multi-core</b> FERREIRA, F.; TRAVIESO, G.; RUGGIERO, C. A. ....	159





<b>PG70 - Complex networks computational modeling of visual attention</b> FERREIRA, S. J. V.; COSTA, L. F. ....	161
<b>PG71 - Transcription initiation complex. mechanochemical characterization and preliminary structural study</b> FLOREZ ARIZA, A.; GUERRA, D. G.; PORTUGAL, R.; CASSAGO, A. ....	162
<b>PG72 - Não linearidades de segundo e terceira ordem de sistemas moleculares ramificados</b> FONSECA, R. D.; MENDONÇA, C. R. ....	163
<b>PG73 - Interações de septinas de <i>Schistosoma mansoni</i> com modelos de membranas</b> FONTES, M. G.; ZERAIK, A. E.; ARAUJO, A. P. U. ....	164
<b>PG74 - A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression</b> STELMASTCHUK, L. B. F.; THIEMANN, O. H. ....	165
<b>PG75 - Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente</b> FORTUNATO, T. C.; BAGNATO, V. S.; MORIYAMA, L. T. ....	166
<b>PG76 - Condução de prótons em materiais cerâmicos à base de <math>Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,82}O_{9-\delta}</math></b> FRANCISCO, L. H.; RODRIGUES, J. E. F. S.; HERNANDES, A. C. ....	167
<b>PG77 - Spatial dynamics of ecosystem engineers: a coupled map lattice approach</b> FRANCO, C.; FONTANARI, J. F. ....	169
<b>PG78 - Avaliação de propriedades do plasma para quantificação de carbono através da espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser</b> FRANCO, M. A. M.; VILLAS BOAS, P. R. ....	171
<b>PG79 - Van der Waals corrections applied to water and ethanol adsorption on noble and transition metal substrates</b> FREIRE, R. L. H.; KIEJNA, A.; DA SILVA, J. L. F. ....	173
<b>PG80 - First and second global sound velocity of a Bose gas across the transition to Bose-Einstein condensation</b> FRITSCH, A. R.; TAVARES, P. E. S.; VIVANCO, F. A. J.; TELLES, G. D.; BAGNATO, V. S.; HENN, E. A. L. ....	175
<b>PG81 - Estudos computacionais da enzima N-Miristoiltransferase de <i>Plasmodium falciparum</i> e seus inibidores como candidatos a agentes antimaláricos</b> GARCIA, M. L.; GUIDO, R. V. C. ....	176



<b>PG82 - Spin-spin correlation functions of the random XX spin-1/2 chain</b> GETELINA, J. C.; HOYOS, J. A. ....	178
<b>PG83 - Angular dependence of Rydberg interactions</b> GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G. ....	179
<b>PG84 - Photophysical characterization of protoporphyrin IX molecule using linear and nonlinear optical spectroscopies</b> GOTARDO, F.; COCCA, L. H. Z.; DE BONI, L. ....	180
<b>PG85 - Desenvolvimento e validação de um sistema de PCR em tempo real</b> GOVONE, A. B.; CASTRO NETO, J. C. ....	181
<b>PG86 - Estimativa da movimentação de dois peixes juntos no escuro</b> GUARIENTO, R. T.; ALMEIDA, L. O. de; STEFANI, I. H. Z. de; GONÇALVES, M. R.; ALVES, A. B.; PINTO, R. D. ....	182
<b>PG87 - Bound state in the continuum in a quantum wire</b> GUESSI, L. H.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. ....	183
<b>PG88 - Thermal expansion coefficient near the critically point in a BEC</b> GUTIERREZ, E. M.; BAGNATO, V. S. ....	184
<b>PG89 - Optical nonlinearities in microstructures produced by two-photon polymerization</b> HENRIQUE, F. R.; MENDONÇA, C. R. ....	185
<b>PG90 - Caracterização de uma beta-xilosidase da família GH5 de Thermogemmatispora sp. T81</b> HIGASI, P.; TOMAZINI, A.; POLIKARPOV, I. ....	186
<b>PG91 - Estudo inicial sobre o perfil motivacional de alunos de graduação em Física</b> HIROTA, L. C. B.; ALMEIDA, N. S.; PAIVA, M. L. M. F.; MUNIZ, S. R.; PAIVA, F. F. ....	188
<b>PG92 - Desenvolvimento de biossensores de baixo custo para detecção precoce de câncer</b> IBÁÑEZ, G.; FATIBELLO FILHO, O.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; GONÇALVES, D. ....	190
<b>PG93 - Optimizing the action of photosensitizers by incorporating an antimicrobial peptide to E. coli lipid monolayers</b> JOCHELAVICIUS, K.; NOBRE, T. M.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; LORENZON, E. N. ....	191
<b>PG94 - A non-linear pattern recognition approach to extract patterns and pseudo-randomness</b> JUSTO, M. J. M.; BRUNO, O. M. ....	192



<b>PG95 - Discovery and development of a cosmetic active for skin oil control</b> KATEKAWA, E.; GUIDO, R. V. C. ....	194
<b>PG96 - Estudo da técnica LIBS em solos</b> KRUGER, A. L.; NICOLODELLI, G.; MILORI, D. M. B. P. ....	195
<b>PG97 - Uso de técnicas fotônicas como ferramenta ubíqua para a agricultura</b> KUBOTA, T. M. K.; MAGALHÃES, A. B.; VILLAS BOAS, P. R.; MILORI, D. M. B. P. ....	197
<b>PG98 - Effects of Lorentz invariance violation in the UHECR spectrum</b> LANG, R. G.; SOUZA, V. ....	199
<b>PG99 - Estudo de episódios históricos no ensino de ciências: Ole Roemer e a velocidade da luz</b> LAPORTE, R. S.; SILVA, C. C. ....	201
<b>PG100 - Estudo sinergismo arabinanase da família GH43: aumento na degradação celulolítica pela Accellerase.</b> LEITE, A. E. T.; NASCIMENTO, A. S.; POLIKARPOV, I. ....	202
<b>PG101 - Protoporphyrin IX silica-based nanostructure for breast cancer and melanoma treatment</b> LEITE, I. S.; VIVERO-ESCOTO, J. L.; LYLES, Z.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M. ....	204
<b>PG102 - Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas: validando as regras de substituição na montagem do filamento</b> LEONARDO, D. A.; GARRATT, R. ....	206
<b>PG103 - Spectroscopic characterization of charge photogeneration and Recombination Dynamics in a Capacitive Organic Solar Cell</b> LIMA FILHO, J. B.; MIRANDA, P. B. ....	208
<b>PG104 - Functional characterization of Trypanosoma brucei spliceosomal protein U515K</b> LIMA, A. L. de; SILVA, M. T. A. da; THIEMANN, O. H. ....	209
<b>PG105 - Estudos estruturais e moleculares de enzimas alvo de Xanthomonas albilineans para o desenvolvimento de novos candidatos a agroquímicos para a cultura de cana-de-açúcar</b> LIMA, G. M. A.; GUIDO, R. V. C. ....	211
<b>PG106 - Termodinâmica de um sistema quântico aberto</b> LIMA, R. B. B.; SOARES-PINTO, D. O. ....	213
<b>PG107 - Investigating the endocytosis and exocytosis of nanomaterials</b> LINS, P.; CANCINO-BERNARDI, J.; ZUCOLOTTO, V. ....	214



<b>PG108 - Chemical and crystallographic characterization of roméite-group minerals</b> LOPES, G. A. C.; ANDRADE, M. B.; ATENCIO, D.; ELLENA, J. ....	215
<b>PG109 - Medição da razão de fluxos de núcleos nos raios cósmicos</b> LORDELLO, V.; VECCHI, M. ....	216
<b>PG110 - Random walk method applied to investigate the NMR measurement</b> LUCAS-OLIVEIRA, E.; ARAÚJO-FERREIRA, A. G.; FORTULAN, C. A.; BONAGAMBA, T. J. ....	217
<b>PG111 - Planejamento e otimização de novos inibidores de polimerização da proteína tubulina</b> MAGALHÃES, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. ....	218
<b>PG112 - A study of the thermodynamics of nanomachines</b> MALVAZI, A. H. A.; BRITO, F. ....	220
<b>PG113 - Desenvolvimento de uma plataforma de métodos de IRM (suite) para a observação de sistemas com T2 muito curtos</b> MARASSI, A. G.; GOMES JUNIOR, F. G.; TANNÚS, A. ....	221
<b>PG114 - Relógios quânticos: mecanismo de Page e Wootters</b> MARTINELLI, T.; SOARES-PINTO, D. O. ....	222
<b>PG115 - Análise das interfaces de interação heterotípicas entre septina-septina</b> MARTINS, C. S.; ARAUJO, A. P. U.; MACEDO, J. N. A. ....	223
<b>PG116 - Estudo da dinâmica de absorção multi-fotônica do GaN através da formatação de pulsos</b> MARTINS, R. J.; SIQUEIRA, J. P.; DIPOLDI, J.; MENDONÇA, C. R. ....	225
<b>PG117 - Nova geração de detectores de múons para o observatório Pierre Auger</b> MARTINS, V. B.; SOUZA, V. ....	226
<b>PG118 - Fenômeno tipo Fermi-Pasta-Ulam em sistemas optomecânicos quânticos</b> MASCHIO, E. H. M.; MOUSSA, M. H. Y. ....	227
<b>PG119 - Modelos in silico preditivos nos estudos de permeabilidade e validação experimental</b> MATOS, K. S.; MAGALHÃES, L. G.; PAULI, I.; MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. ....	228
<b>PG120 - Utilização de espectroscopia de fluorescência e espectroscopia Raman para avaliação de AGEs na pele para diagnóstico não invasivo de diabetes.</b> MATTOS, V. S.; PAOLILLO, F. R.; OLIVEIRA, A. O.; MATOS, L.; ARTHUZO, G.; BAGNATO, V. S.; CASTRO NETO, J. C. ....	230



<b>PG121 - Order-chaos transition in collective scattering of light by cold atoms</b> MAXIMO, C. E.; BACHELARD, R. ....	232
<b>PG122 - Sugarcane bagasse adapted microbial community from compost: from the metatranscriptome to enzyme characterization</b> MELLO, B. L.; ALESSI, A. M.; GUIMARÃES, F. E. G.; RIAÑO-PACHÓN, D. M.; MCQUEEN-MASON, S.; BRUCE, N. C.; POLIKARPOV, I.....	233
<b>PG123 - DNA encapsulation for antisense gene therapy</b> MELO, C. C.; ZUCOLOTTO, V.; CANCINO-BERNARDI, J.....	235
<b>PG124 - Automontagem de filamentos de septinas estudada por microscopia eletrônica.</b> MENDONÇA, D. C.; PORTUGAL, R. V.; CASSAGO, A.; ARAÚJO, A. P. U.; GARRATT, R. C. ...	236
<b>PG125 - Remoção de ruídos de origem biológica em espectroscopia por ressonância magnética através de filtros baseados em transformadas wavelet</b> MENEZES, L. P.; PAIVA, F. F. ....	238
<b>PG126 - Spontaneous symmetry breaking: Monte Carlo study comparing Metropolis and worm algorithm</b> MIGLORIA, A.; MENDES, T. C. R. ....	239
<b>PG127 - Measuring the influence of the laser pulse width on nonlinear refractive index of organic solvents by nonlinear ellipse rotation</b> MIGUEZ, M. L.; MISOGUTI, L.....	240
<b>PG128 - Electron detection with the AMS-02 experiment</b> MIKUNI, V. M.; VECCHI, M. ....	242
<b>PG129 - Descelularização de traqueia suína utilizando equipamento multifuncional</b> MION, W.; SOUZA, A. V. G.; MORRETI, T. A.; DEFFUNE, E.; BAGNATO, V. S.; GUIMARÃES, F. E. G.....	243
<b>PG130 - Caracterização do RNA de virus ZYMV por ressonância de superfície plasmons</b> MIRANDA, M. M. P.; MAREGA JUNIOR, E. ....	244
<b>PG131 - Proposta de execução rápida para obter correlações entre <math>T_1</math> e <math>T_2</math> em ressonância magnética nuclear</b> MONTRAZI, E. T.; LUCAS-OLIVEIRA, E.; ARAUJO-FERREIRA, A. G.; BONAGAMBA, T. J. ....	246
<b>PG132 - Produção e estudos estruturais de heterocomplexos de Septinas</b> MORAIS, S. T. B.; ARAUJO, A. P. U. ....	248
<b>PG133 - Reversão temporal na linguagem operacional da mecânica quântica</b> MORAZOTTI, N. A. C.; NAPOLITANO, R. J. ....	250



**PG134 - Endocytosis of pulchellin in HeLa cells**

MOREIRA, H. H. T.; LOPES, J. L.; SANDVIG, K.; LINGELEM, A, B, D.; ARAÚJO, A. P. U. .... 252

**PG135 - Estudos moleculares de enzimas do fungo termofílico *Thielavia terrestris* cultivado em bagaço de cana e desenvolvimento deste como novo chassi de expressão de proteínas**

MULINARI, E. J.; SEGATO, F.; MUNIZ, J. R. C..... 253

**PG136 - LiBELa: um método híbrido baseado na estrutura do ligante e receptor para docagem molecular**

MUNIZ, H. S.; NASCIMENTO, A. S..... 254

**PG137 - Preference for short chain substrate by a *Bacillus licheniformis* carboxylesterase and its bases on structural inferences**

NAKAMURA, A. M.; GODOY, A.; KADOWAKI, M. A. S.; POLIKARPOV, I..... 256

**PG138 - O processo da matematização da eletrostática no século XVIII: um estudo histórico-crítico**

NARDI, L. M. C.; SILVA, C. C..... 257

**PG139 - Photophysical processes on biological tissues and photodynamic therapy using steady-state and time-resolved fluorescence techniques: diagnosis applications, dosimetry and photodegradation kinetics**

NOGUEIRA, M. S.; GUIMARÃES, F. E. G..... 259

**PG140 - Caracterização epidemiológica molecular de MRSA de São Carlos incluem presença de resistência heterogênea**

OKADO, J. B.; UEMURA, E. R.; BOGNI, S. C.; CAMARGO, I. L. B. C..... 261

**PG141 - Aproximantes de Padé e a série perturbativa da QCD em decaimentos  $\tau \rightarrow$  (hádrons) +  $\nu_\tau$**

OLIANI, F. H.; BOITO, D. R. .... 263

**PG142 - Hamiltoniano não linear na teoria do laser**

OLIVEIRA NETO, F.; MOUSSA, M. H. Y. .... 265

**PG143 - Descoberta e planejamento de novos agroquímicos para o combate da escaldadura das folhas**

OLIVEIRA, A. A.; GUIDO, R. V. C..... 266

**PG144 - Evaluation of coaxial fundus camera**

OLIVEIRA, A. O.; MATOS, L.; CASTRO NETO, J. C..... 267

**PG145 - Photonic decontamination of circulating fluids**

OLIVEIRA, B. P.; BAGNATO, V. S. .... 268



<b>PG146 - Desenvolvimento de ferramenta computacional para obtenção automatizada de dados em testes comportamentais do tipo campo aberto</b> OLIVEIRA, I. M.; PAIVA, F. F.....	269
<b>PG147 - Estudos no diamante para aplicações em tecnologias quânticas</b> ONCEBAY SEGURA, C.; ALMEIDA, J. M. P.; MUNIZ, S. R. ....	271
<b>PG148 - Desenvolvimento de uma matriz dérmica a base de celulose visando o crescimento celular direcional</b> ONO, B. A.; SHARMA, R. I.; CAMPANA-FILHO, S. P.; GUIMARÃES, F. E. G.....	273
<b>PG149 - Contrast optimization in multiphase arterial spin labeling</b> PASCHOAL, A. M.; PAIVA, F. F.; LEONI, R. F. ....	275
<b>PG150 - Continuous production of <math>Rb_2</math> molecules in the ground vibrational state in an optical dipole trap</b> PASSAGEM, H. F.; SILVA, P. C. V.; RODRIGUEZ, R. C.; MARCASSA, L. G. ....	277
<b>PG151 - Estudos estruturais e funcionais de novos ligantes sintéticos do receptor PPAR<math>\gamma</math></b> PAULA, K.; NASCIMENTO, A. S.....	278
<b>PG152 - Development and application of high-resolution x-ray imaging techniques for morphological characterization of microfossils</b> PERES, L. M. C.; GALANTE, D. ....	280
<b>PG153 - Dynamics of Kuramoto oscillators in complex networks</b> PERON, T. K. D'M.; RODRIGUES, F. A. ....	281
<b>PG154 - Estudo da dinâmica, interação e internalização de Fotossensibilizador em biofilme e em cultura planctônica de <i>Streptococcus mutans</i> pré induzido por luz</b> PINTO JUNIOR, F. F.; GUIMARÃES, F. E. G.....	283
<b>PG155 - Terapia fotodinâmica por absorção de 2-fótons para o tratamento do melanoma ocular</b> PIRES, L.; KHATTAK, S.; YUCEL, Y. H.; BAGNATO, V. S.; WILSON, B. C.; KURACHI, C. ....	284
<b>PG156 - PyMR - um framework para programação generalizada de sistemas de ressonância magnética</b> PIZETTA, D. C.; SILVA, L. C. R. ; SOUZA, P. V. B. D.; FALVO, M.; COELHO, F. B.; VIDOTO, E. L. G.; MARTINS, M.; TANNÚS, A. ....	286
<b>PG157 - Utilização de espectros Raman com processamento computacional para identificação de minerais</b> QUEIROZ, A. A. A. E.; ANDRADE, M. B.; ELLENA, J. ....	287



<b>PG158 - Evaluation of Mad Soy II diagnosis in pelletized soybean leaves by macronutrient analysis obtained by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)</b> RANULFI, A. C.; SENESI, G. S.; CAETANO, J. B.; MEYER, M.; MAGALHAES, A. B.; VILLAS-BOAS, P. R.; MILORI, D. M. B. P.....	288
<b>PG159 - Otimização nos processos da formação e distribuição de PpIX no tratamento de câncer de pele por Terapia Fotodinâmica: dispositivos de aplicação intradérmica</b> REQUENA, M. B.; VOLLET FILHO, J. D.; RUSSIGNOLI, P. E.; SALVIO, A. G.; MENEZES, P. F. C.; BAGNATO, V. S. ....	290
<b>PG160 - Instabilities of fermionic, vectorial and tensorial fields in curved spacetimes.</b> RIBEIRO, C.; VANZELLA, D. ....	292
<b>PG161 - Conjugation of nanocapsules with tumor targets for therapeutic and diagnostic applications against cancer</b> RIBOVSKI, L.; CANCINO-BERNARDI, J.; ZUCOLOTTO, V.....	293
<b>PG162 - Structural ordering and dielectric properties of Ba<sub>3</sub>CaNb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>-based microwave ceramics</b> RODRIGUES, J. E. F. S.; CASTRO, P. J.; PIZANI, P. S.; CORRER, W. R.; HERNANDES, A. C...	294
<b>PG163 - Intensificação da penetração de medicamentos e formação de PpIX para terapia fotodinâmica</b> RODRIGUES, P. G. S.; ROCHA, R. W.; ESCOBAR, A.; NARDI, A. B.; KURACHI, C.; BAGNATO, V. S. ....	295
<b>PG164 - Present of Brazilian Cesium fountain Br-CsF</b> RODRIGUEZ, A. D.; BUENO, C.; BAGNATO, V. S.; MAGALHÃES, D. V.....	297
<b>PG165 - Monitoramento em tempo real de fotossensibilizadores em células e micro-organismos por meio de técnicas avançadas de microscopia confocal de fluorescência</b> ROMANO, R. A.; PRATAVIEIRA, S.; BAGNATO, V. S.; GUIMARÃES, F. E. G. ....	298
<b>PG166 - Comparação e caracterização de redes de interação de proteínas</b> RONQUI, J. R. F.; BAGNATO, G. G.; TRAVIESO, G. ....	299
<b>PG167 - Development of a fluorescence lifetime imaging rigid endoscope for clinical applications</b> ROSA, R. G. T.; JO, J.; PRATAVIEIRA, S.; KURACHI, C. ....	301
<b>PG168 - Regulação de biofilme bacteriano através de domínios GGDEF-EAL.</b> ROSSETO, F. R.; NAVARRO, M. V. A. S. ....	302





<b>PG169 - Simulações quânticas</b> ROSSETTI, R. F.; MOUSSA, M. H. Y. ....	304
<b>PG170 - Optical and fundamental band gaps disparity of the <math>\text{In}_2\text{O}_3</math> and <math>\text{SnO}_2</math> systems revisited</b> SABINO, F. P.; OLIVEIRA, L. N.; WEI, S.-H.; SILVA, J. L. F. ....	306
<b>PG171 - Conjugation of Pulchelline A chain and Ricin A chain to HIV mAbs, and study the characterization and cell internalization by using confocal microscopy and flow cytometry</b> SADRAEIAN, M.; GUIMARÃES, F. E. G.; PINCUS, S.; ARAÚJO, A. P. U.; HELLEN, H. ....	308
<b>PG172 - Conversion of poly(xylylidene tetrahydrothiophenium chloride)(PTHT) in poly(p-phenylenevinylene)(PPV) by femtosecond pulses</b> SALAS, O. A.; BALOGH, D. T.; ALMEIDA, J. M. P.; FONSECA, R. D.; ALMEIDA, G. F. B.; HENRIQUE, F. R.; MENDONÇA, C. R. ....	310
<b>PG173 - Estudos de modelagem molecular de moduladores de microtúbulos bioativos</b> SALCEDO, D. L. P.; MAGALHÃES, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. ....	311
<b>PG174 - Characterization of odorant-binding proteins of <i>Rhodnius prolixus</i></b> SAMPAIO, R. P.; THIEMANN, O. H. ....	312
<b>PG175 - Coupled oscillators and Ott-Antonsen invariant manifold description</b> SANTOS, E. R.; ELDERING, J.; PEREIRA, T. ....	313
<b>PG176 - Top gated graphene field effect transistors for sensing applications</b> SANTOS, F. A.; VIEIRA, N. C. S.; ZAMBIANCO, N.; ZUCOLOTTO, V. ....	315
<b>PG177 - Anisotropic water adsorption on gypsum (010) from a combination of SFG vibrational spectroscopy and molecular dynamics simulations</b> SANTOS, J. C. C.; NEGREIROS, F. R.; DALPIAN, G. M.; PEDROZA, L. S.; MIRANDA, P. B. ....	316
<b>PG178 - Theranostic plasmonic nanoparticles for application in cancer phototherapy</b> SANTOS, O. A.; CANCINO-BERNARDI, J.; ZUCOLOTTO, V. ....	317
<b>PG179 - Characterization of components of the selenocysteine biosynthesis and insertion pathways in <i>Naegleria gruberi</i>: selenophosphate synthetase and tRNA<sup>sec</sup></b> SANTOS, T. M.; THIEMMAN, O. H. ....	318
<b>PG180 - O uso de técnicas biofotônicas no diagnóstico de doenças de soja</b> SBRISSA NETO, D. A.; MILORI, D. M. B. P. ....	320



<b>PG181 - Complex networks on the analysis of multispectral images obtained by confocal laser scanning microscopy</b> SCABINI, L. F. dos S.; BRUNO, O. M. ....	322
<b>PG182 - Dynamical correlation functions of a two-spin operator in quantum spin chains</b> SCHOSSLER, M. O.; PEREIRA, R. G. ....	323
<b>PG183 - Identificação e caracterização das proteínas interagentes ao elemento SECIS (SelenoCysteine Insertion Sequence) em Naegleria gruberi</b> SCORTECCI, J. F.; SERRÃO, V. H. B.; THIEMANN, O. H. ....	324
<b>PG184 - Two-component Landau liquid model for new state of matter</b> SERENONE, W. M.; MENDES, T. ....	326
<b>PG185 - Characterization of macromolecular interactions from Escherichia coli selenocysteine incorporation pathway</b> SERRÃO, V. H. B.; FERNANDES, A. F.; SCORTECCI, J. F.; BASSO, L. G. M.; HEEL, M. V.; PORTUGAL, R. V.; THIEMANN, O. H. ....	328
<b>PG186 - PIFLOW - projeto, simulação e implementação de um protótipo dataflow em FPGA</b> SILVA JUNIOR, J. T. da; MATIAS, P.; RUGGIERO, C. A. ....	330
<b>PG187 - Differential geometry and information theory application to protein conformational analyses</b> SILVA NETO, A. M.; MONTALVÃO, R. W. ....	332
<b>PG188 - Novas estratégias para o diagnóstico e tratamento de onicomicose por terapia fotodinâmica</b> SILVA, A. P.; BAGNATO, V. S.; INADA, N. M. ....	334
<b>PG189 - O KBDM como ferramenta para o processamento de dados clínicos de espectroscopia por ressonância magnética: LLC-KBDM</b> SILVA, D. M. D. D.; PAIVA, F. F. ....	336
<b>PG190 - Caracterização de um novo mecanismo de controle do regulador intracelular bacteriano c-di-GMP</b> SILVA, E. E. D.; CARDOSO, A. R.; MENEGHELLO, R.; NAVARRO, M. V. A. S. ....	338
<b>PG191 - Desenvolvimento de drug delivery systems para o tratamento de câncer de pele não-melanoma associado à terapia fotodinâmica</b> SILVA, G. R.; BAGNATO, V. S.; MASCARENHAS, Y. P.; INADA, N. M. ....	340



<b>PG192 - Observação de coerência quântica invariante no tempo em sistemas de ressonância magnética</b> SILVA, I. A.; SOUZA, A. M.; GLASER, S.; ADESSO, G.; SOARES-PINTO, D. O.; AZEVÊDO, E. R.....	342
<b>PG193 - Técnica para análise de fenômenos a tempo curto</b> SILVA, R. M.; MOUSSA, M. H. Y.....	344
<b>PG194 - Determination of protein-protein complexes from sparse experimental data</b> SILVA, S. R.; MONTALVÃO, R. W.....	345
<b>PG195 - Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos degenerados</b> SMAIRA, A. de F.; TELLES, G. D.; BAGNATO, V. S.....	347
<b>PG196 - Efeitos coletivos nos processos de interação radiação-matéria: superátomos, superradiância e superabsorção</b> SOARES, P. M.; MOUSSA, M. H. Y.....	348
<b>PG197 - Energy shift in QD levels induced by interaction with SPPs</b> SOBREIRA, F. W. A.; MAREGA JUNIOR, E.; PEREIRA, R. G.....	350
<b>PG198 - Organic metal-insulator-semiconductor capacitors based on spin-coated P3HT-PVP films for sensing applications</b> SOUSA, M. A. M.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.....	351
<b>PG199 - Desenvolvimento de modelos farmacofóricos para inibidores não covalentes da cruzaina</b> SOUZA, A. S.; OLIVEIRA, M. T.; ANDRICOPULO, A. D.....	352
<b>PG200 - Structural biology and medicinal chemistry studies toward the Discovery of new Plasmodium falciparum enolase inhibitors</b> SOUZA, G. E.; GUIDO, R. V. C.....	354
<b>PG201 - Planejamento de novos inibidores da enzima cruzaina candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas</b> SOUZA, M. L. de; FERREIRA, R. S.; REZENDE, C.; CHAVEZ, R.; DIAS, L. C.; KROGH, R.; AGUIAR, C.; CRUZ, F.; OLIVA, G.; ANDRICOPULO, A. D.....	356
<b>PG202 - Pulse width dependency of nonlinear refractive index in gaseous samples</b> SOUZA, T. G. B.; MISOGUTI, L.....	358
<b>PG203 - Avaliação termográfica de lesões cutâneas</b> STRINGASCI, M. D.; SALVIO, A. G.; SBRISSA NETO, D.; VOLLET FILHO, J. D.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.....	360



<b>PG204 - Photoactivated release of silver nanoparticles for bacterial control</b> SUÁREZ BALLESTEROS, C. A.; CORREA, D.; ZUCOLOTTI, V.....	361
<b>PG205 - Influence of energy structure on recombination lifetime in GaAs/AlGaAs multilayers</b> TAVARES, B. G. M.; TITO, M. A.; PUSEP, Y. A.....	362
<b>PG206 - Geração de estados de Fock e o laser via interação Jaynes-Cummings não-linear</b> TEIZEIN, V. F.; ROSSETTI, R. F.; ARAÚJO, H. S.; OLIVEIRA NETO, F.; MORAES NETO, G. D.; MOUSSA, M. H. Y.....	363
<b>PG207 - New solid forms of anti-HIV drug lamivudine (3TC): supramolecular synthons in the tunability of physicochemical properties</b> TENORIO, J. C.; ELLENA, J.....	365
<b>PG208 - Detection of long-range black hole hair through quasi-normal modes.</b> TEODORO, M. C.; HARTMANN, B.....	366
<b>PG209 - Auger recombination processes in InGaAs/InP quantum wells</b> TITO, M. A.; PUSEP, Y. A.; GOLD, A.; TEODORO, M. D.; MARQUES, G. E.; LAPIERRE, R. R.	368
<b>PG210 - Femtosecond laser fabrication of high-Q whispering gallery mode polymeric microresonators</b> TOMAZIO, N. B.; OTUKA, A. J. G.; ALMEIDA, G. F. B.; ROSELLÓ-MECHÓ, X.; ANDRÉS, M. V.; MENDONÇA, C. R.....	369
<b>PG211 - Efeitos do thinning sobre o perfil de produção de múons</b> TOMISHIYO, G.; SOUZA FILHO, L. V. ....	370
<b>PG212 - Desenvolvimento e melhoramento da enzima Taq polimerase Hot Start para aplicações biotecnológicas</b> TORRES, N. U.; MALUF, F. V.; MUNIZ, A. B.; GUIDO, R. V. C.....	371
<b>PG213 - Nuclear magnetic resonance for oil and gas well logging applications</b> TREVIZAN, W.; BONAGAMBA, T. J. ....	372
<b>PG214 - On symmetry breaking and the Unruh effect</b> ULIANA, C.; VANZELLA, D. A. T.....	373
<b>PG215 - Dinâmica dos éxcitons e transporte de carga em heteroestruturas orgânicas contendo modulação energética visando a aplicação em OLEDs</b> VALENTE, G. T.; GUIMARÃES, F. E. G.....	374
<b>PG216 - Adiabatic quantum computing using superconducting qubits</b> VARGAS, J.; BRITO, F. ....	376



<b>PG217 - Análise dos quantificadores da desordem em superfluidos atômicos de <math>^{87}\text{Rb}</math> altamente perturbados</b>	
VIVANCO, F. J.; TAVARES, P. E. S.; FRITSCH, A. R.; TELLES, G. D.; HENN, E. A. L.; BAGNATO, V. S. ....	377
<b>PG218 - Substrate Interaction at single molecule level to organic semiconductors</b>	
ZAGO, L. A.; GUIMARÃES, F. E. G. ....	379
<b>PG219 - Descontaminação de biofilmes com terapia fotodinâmica em tubo endotraqueal</b>	
ZANGIROLAMI, A. C.; BLANCO, K. C.; BAGNATO, V. S. ....	380
<b>PG220 - Density Functional Theory for strong correlated systems</b>	
ZAWADZKI, K.; OLIVEIRA, L. N.; D'AMICO, I. ....	382



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP



## IC1

# Estados ligados quark antiquark e correções de alfa s no potencial

ANJOS, C. F.<sup>1</sup>; BOITO, D.<sup>1</sup>

cayke.anjos@usp.br

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

Este trabalho objetiva a descrição precisa de estados ligados de um quark e um antiquark utilizando a equação de Schrödinger para o potencial da Cromodinâmica Quântica. (1) Tipicamente este sistema é apenas solúvel utilizando o formalismo de Teoria Quântica de Campos, porém quando lidamos com quarks muito massivos, cuja energia de repouso é maior que a velocidade típica do estado ligado, métodos não-relativísticos podem ser utilizados com pequenas correções. O potencial utilizado apresenta características importantes da nossa teoria: possui um termo coulombiano obtido pela troca de um glúon e um termo linear que confina os quarks. Primeiramente, desenvolvemos um método para resolver a eq. de Schrödinger com o potencial coulombiano para o átomo de Hidrogênio, que possui descrição analítica exata e comparamos com os resultados já tabelados. Posteriormente adotamos o mesmo método para resolver os sistemas: charmonium e o bottomonium. Os resultados foram comparados com os do Particle Data Group ou cálculos feitos por outros grupos.(2-3) Os resultados são obtidos a partir da definição da autoenergia como parâmetro livre na eq. de Schrödinger e da resolução desta equação diferencial em um ponto distante da origem (infinito), onde a função de onda deve ter valor nulo por ser quadrado integrável. Obtemos, então uma curva da função de onda no infinito em função do valor do nosso parâmetro, cujas raízes (pontos em que a função de onda se anulam) são as energias dos respectivos estados ligados. Com o autovalor, conseguimos resolver a eq. de Schrödinger trivialmente como qualquer eq. diferencial. Para o átomo de H os desvios de energia foram da ordem de dez elevado a menos 5 por cento, enquanto que nos mésons, o desvio máximo foi de 4%. A seguir, esperamos introduzir novos termos no Hamiltoniano e trazer correções ao potencial com o intuito de descrevermos nosso sistema com uma precisão melhor. Dada a função de onda com baixos desvios, esperamos calcular por teoria de perturbação, elementos de matrizes de operadores importantes para transições energéticas do sistema de quarks, por exemplo.

**Palavras-chave:** QCD. Quarkonium. Equação de Schrödinger.

### Referências:

1 EICHTEN, E. et al. Charmonium: comparison with experiment. **Physical Review D**, v. 21, p. 203–233, 1980. doi: 10.1103/PhysRevD.21.203.

2 DENG, W. J. et al. **Spectrum and electromagnetic transitions of bottomonium**. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/1607.04696v1.pdf>>. Acesso em: 29 ago. 2016 .

3 DENG, W. J. et al. **Spectrum and electromagnetic transitions of charmonium**. Disponível em:



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

<<https://arxiv.org/pdf/1608.00287v2.pdf>>. Acesso em: 29 ago. 2016.





## IC2

# Avaliação da interação entre a proteína CrNIP7 de *Chlamydomonas reinhardtii* com potenciais proteínas parceiras

BARRA, A. L. C.<sup>1</sup>; GUTIERREZ, R. F.<sup>1</sup>; ARAÚJO, A. P. U.<sup>1</sup>

angelica.barra@usp.br

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

As proteínas envolvidas na biossíntese de ribossomo têm, em geral, sequências altamente conservadas em Eukarya e são melhor estudadas em *Saccharomyces cerevisiae*. Desta forma, o entendimento desse sistema altamente complexo e coordenado em leveduras tem sido usado como modelo para eucariotos superiores, como os mamíferos. No entanto, estudos da biogênese de ribossomos em humanos já destacou proteínas com funções diferentes das suas homólogas em leveduras. Uma das proteínas essenciais para esse processo, a NIP7, já foi caracterizada com função divergente entre humanos e leveduras. (1) Enquanto Nip7p de leveduras atua na biogênese da subunidade maior (60S) do ribossomo; a homóloga HsNIP7, de humanos, atua na formação da subunidade menor (40S) do ribossomo. Deste modo, a proteína CrNip7, de *Chlamydomonas reinhardtii* (uma alga verde unicelular), homóloga às NIP7 de humanos e levedura, está sendo estudada no nosso laboratório quanto a sua função e parceiros de interação. Assim, este projeto teve como objetivo a validação das potenciais interações proteicas envolvendo CrNIP7 identificadas previamente por duplo híbrido em leveduras. As técnicas escolhidas para a validação *in vitro* foram *pull down* e dicroísmo circular (CD). Para isso, a proteína CrNIP7 e suas potenciais parceiras, CrSBDS e *predicted*, foram expressas em *E. coli* e foram purificadas por cromatografia de afinidade e de exclusão molecular. Após a purificação, as proteínas foram submetidas à interação, que foi avaliada por *pull down* (fusões com SUMO e GST) e CD. O ensaio de *pull down* entre as proteínas CrSBDS e CrNIP7 demonstrou a interação *in vitro* entre elas. No experimento de CD, observou-se que o espectro de CD da mistura CrSBDS e CrNIP7 apresentou uma leve alteração em relação ao espectro teórico calculado para a soma dos espectros de cada proteína separadamente. No entanto, a alteração observada estava dentro do erro experimental e, assim, não foi possível demonstrar a interação por essa técnica. É possível que essa interação não cause uma alteração que seja detectável por CD, carecendo, então, de outros experimentos que permitam avaliá-la, como por exemplo a microcalorimetria de titulação isotérmica. Já o ensaio de *pull down* com a proteína *predicted* utilizando a fusão com GST ainda está em andamento. A purificação de *predicted* utilizando a fusão com a proteína SUMO foi bastante promissora, disponibilizando a proteína em quantidade e grau de pureza adequados para uma análise de sua estrutura secundária e de sua estabilidade térmica por CD, contudo a interação de *predicted* com CrNIP7 ainda precisa ser confirmada.

**Palavras-chave:** CrNIP7. Validação de interação. *Pull down*.

### Referências:

1 MORELLO, L. G. **Caracterização funcional das proteínas NIP7 e FTSJ3 no processamento o RNA ribossomal em células humanas.** 2012. 127 p. Tese (Doutorado em Genética e Biologia



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

Molecular) - Instituto de Biologia, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012.



## IC3

# Melhoria na percepção teórico-experimental de visitantes do Museu Professor Mário Tolentino

BORGES, M. C. T.<sup>1</sup>; YOSHIOKA, A. K.<sup>2</sup>; MASCARENHAS, Y. P.<sup>1</sup>

maria.clara.borges@usp.br

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

<sup>2</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

O Museu da Ciência de São Carlos Professor Mário Tolentino, localizado na Praça Coronel Sales (no centro da cidade), foi inaugurado em 2012 tendo sido concebido para ser um espaço de educação e de convivência com temas de ciências, tecnologia e arte. Um espaço interativo, que tem o objetivo de desmistificar e tornar agradável a aprendizagem e o ensino de Ciências, e recebe centenas de visitantes de diversas faixas etárias e de diversos níveis de escolaridade todos os meses do ano. Nosso trabalho consistiu em produzir placas explicativas para os experimentos de física expostos nesse museu, com o objetivo de auxiliar os monitores, que não são da área de Física, e também melhorar a experiência dos visitantes do museu, que assim podem saber como o experimento funciona mesmo sem a presença de um monitor. As placas serão impressas e expostas ao lado dos experimentos, junto com uma versão em inglês. Inicialmente fizemos uma visita ao museu para conhecer cuidadosamente cada um dos experimentos. A seguir a equipe do museu nos enviou, por email, o nome e uma foto de cada experimento. Definimos a "cara" das plaquinhas da seguinte forma: na parte de cima, nome e foto do experimento e área da física a que ele se refere. Em seguida explica-se o que deve ser feito pelo visitante para que o experimento funcione, e depois é apresentado o que deve ser observado. Logo abaixo, um quadro explica o conceito físico envolvido e porque aquele fenômeno acontece. Finaliza-se com um texto sobre uma aplicação daquele conceito no dia a dia das pessoas. Como já tínhamos visto os experimentos em funcionamento, tínhamos uma ideia de quais conceitos físicos estariam envolvidos em cada um deles, no entanto, precisávamos entender bem cada um dos assuntos para conseguir explicá-los da maneira mais clara possível. Para isso, foram feitas muitas pesquisas, em livros (1-2) e na internet, a respeito da teoria por trás de cada experimento. Em seguida, discutíamos entre nós qual seria a forma mais didática de apresentar aqueles conceitos para o público em geral, já que o nosso principal objetivo era que as placas fossem bem claras e com imagens para que se tornassem interessantes e de simples entendimento mesmo para aqueles visitantes que não são da área de Física. Foram feitas, ao todo, placas para 70 experimentos do museu, relacionados às áreas de Mecânica, Óptica, Eletromagnetismo e Acústica. Assim que as placas estiverem fixadas nos experimentos, pretendemos aplicar um questionário específico para os professores e outro para os alunos que visitarem o museu, para termos um retorno sobre o aproveitamento promovido por essas plaquinhas aos futuros visitantes. Com isso, pretendemos investigar se alcançamos nossos objetivos e também verificar quais os pontos que ainda precisam ser melhorados.

**Palavras-chave:** Percepção no museu. Experimentos. Física no cotidiano.

**Referências:**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

1 NUSSENZVEIG, H. M.. **Curso de física básica**: mecânica. São Paulo: Blucher, 2002. v.1. 105-182; p. 223-309

2 HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J.. **Fundamentos de física**: optica e física moderna. Rio de Janeiro: LTC, 2008. v.4. p. 39-63



## IC4

# Introduction to the electroweak theory

BOTELHO JUNIOR, M. V.<sup>1</sup>; CUCCHIERI, A.<sup>1</sup>

moacyr.botelho@usp.br

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

The main objective of this work was the study of the fundamental ideas on which the Weinberg-Salam-Glashow (WSG) Theory is based. Using the Lagrangian mechanics, studies were made of conservation laws and of classical field theory. Maxwell's equations and electromagnetism gauge invariance were also studied. The main motivations of the WSG Theory was the introduction of a model, which could describe the interaction of three massive bosons (forbidden in the Quantum Electrodynamics) and the unification weak interactions with electromagnetics. The Unification Theory is made with  $SU(2) \times U(1)$  symmetry. The symmetry transformations, which leaves the Lagrangian of this system invariant, allows finding the conserved quantities of the theory. At the same time, the interactions terms between Gauge bosons and matter fields are obtained and interpreted using Feynman's diagrams. The other main goal was to understand how the weak-interaction bosons acquire mass. For this, one employs the Spontaneous Symmetry Breaking. By considering the Lagrangian bellow  $L(x) = D^\mu \phi(x) D_\mu \phi^*(x) - \mu^2 \phi^2(x) - \lambda \phi^4(x)$ , one sees that ground state of the potential is degenerate if  $\mu^2 > 0$ . Thus, we can select a specific vacuum state and consequently, break the symmetry of the potential. By applying the Higg's mechanism, it is then possible to verify that the Gauge field appears in a quadratic scalar term, which can be interpreted as a mass for the corresponding particle. (1-2) In 1983, the  $W^+$ ,  $W^-$  and  $Z^0$  bosons were found in the UA1 experiment at CERN. Their masses had the approximated value in 80 MeV and 91 MeV, respectively. However, the fundamental result necessary to complete the Standard Model appeared only in 2013, when the particle theorized by P. Higgs and F. Englert, for which they won the Nobel prize, was found at CERN by the ATLAS collaboration

**Keywords:** Electroweak interaction. Gauge symmetry. Spontany symmetry breaking.

### Referências:

1 MANDL, F. **Quantum field theory**. Chichester: Wiley, 1993. 358 p.

2 CHENG, T.-P.; LI, L.-F. **Gauge theory elementary particle physics**. Oxford: Clarendon Press, 1988. 536 p.



## IC5

# Enhancement and optical characterization of a fluorescence microendoscope adapted to smartphone

BROGNARA, G.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

gabrielbrognara@hotmail.com

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

Aimed at achieving an in situ diagnosis at cellular level of Intraepithelial Neoplasia Cervical, we developed a portable fluorescence microendoscope that has the potential of achieving a fast and non-invasive diagnostic through the fluorescence analysis emitted by a nuclear marker. (1-2) This project intended to improve and describe the optics of this equipment, and also develop a routine analysis of the obtained images. The system has two operating settings that are easily interchangeable and adapted to smartphones. One of them consists of a conventional microscope for smear cytology, while the other is an endoscope consisting of a fiber bundle. For both, an optical characterization was performed by determining the spectra of the filters, dichroic mirrors, LED and marker (Proflavine). In addition, it was calculated the resolution, magnification and field of view. Then, we performed the analysis of healthy oral mucosa and cervical neoplastic cells images. Motivated by the same, I developed a software in MatLab to perform image processing, especially those collected on slides, to obtain a reference value for the mean area ratio for nuclear (and cytoplasmic) perimeter for the healthy cells. Through the images, it was observed that the marker was specific to the nucleus and the cytoplasm, with an excitation wavelength of 445 nm and emission 510 nm, justifying the spectra of filters, dichroic and LED used. It was noted that the image obtained by preparing slides has a better delimitation from the cytoplasm, whereas the acquired from the fiber has a large amount of cells in a single image. However, both configurations have a high resolution and magnification. As regards the processing of the images, it has been calculated that the parameters have a large standard deviation, indicating a low sensitivity - factor that can complicate the process of diagnosis of neoplasia. In this project, a high resolution, portable and cheap fluorescence microendoscope system was developed. As a result, it has a great potential to be used in every doctor's office.

**Keywords:** Microendoscope. Fluorescence. Neoplasia.

### Referências:

- 1 QUINN, M. K. et al. High-resolution microendoscopy for the detection of cervical neoplasia in low-resource settings. **PLoS One**, v. 7, n. 9, p. e44924-1-e44924-6, 2012.
- 2 PIERCE, M.; YU, D.; RICHARDS-KORTUM, R. High-resolution fiber-optic microendoscopy for in situ cellular imaging. **Journal of Visualized Experiments**, v. 47, p. e2306-1-e2306-5, 2011. doi: 10.3791/2306.



## IC6

# Effect of the primary cosmic ray flux on the secondary positron flux

BUENO, E. F.<sup>1</sup>; VECCHI, M.<sup>1</sup>; CAROFF, S.<sup>2</sup>; BOUDAUD, M.<sup>3</sup>

eduardo.ferronato.bueno@usp.br

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

<sup>2</sup>LAPP - Université de Savoie & CNRS

<sup>3</sup>LAPTh - Université de Savoie & CNRS

In view of the latest publications of the primary CR fluxes, namely proton and helium flux from AMS-02(1)(2) and CREAM(3), we aim at re-evaluating the positron flux coming from conventional astrophysical processes, i. e. secondary positrons. Moreover, we plan to estimate how the experimental uncertainties on the primary CR fluxes affect the secondary positrons. We carefully study the effect of the primary flux experimental uncertainties on the secondary flux. We find that the experimental uncertainties have little impact on the secondary positron flux. The study effect of the primary flux uncertainties on the constraints on dark matter and we find that it is at the percent level.

**Keywords:** Cosmic rays. Positrons. Astroparticles.

### Referências:

1 AGUILAR, M. et al. Precision measurement of the helium flux in primary cosmic rays of rigidities 1.9 GV to 3 TV with the Alpha Magnetic spectrometer on the International Space Station. **Physical Review Letters**, v. 115, n. 21, p. 211101, 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.115.211101.

2 AGUILAR, M. et al. Precision measurement of the proton flux in primary cosmic rays from rigidity 1 GV to 1.8 TV with the Alpha Magnetic spectrometer on the International Space Station. **Physical Review Letters**, v. 114, n. 17, p. 171103, 2014. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.171103.

3 YOON, Y. S. et al. Cosmic-ray proton and helium spectra from the first cream flight. **The Astrophysical Journal**, v. 728, n. 2, p. 122, 2011. doi: 10.1088/0004-637X/728/2/122.



## IC7

# Accurate determination of the nuclear quadrupole moment of xenon from the molecular method

CANELLA, G. A.<sup>1</sup>; SANTIAGO, R. T.<sup>1</sup>; HAIDUKE, R. L. A.<sup>1</sup>

guilherme.canella@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

An easy way to gain access to information about the nuclear charge distribution of specific atoms is through their nuclear electric quadrupole moment (NQM) values. Hence, this property has been subject to several investigations along the years and the atomic or molecular methods are usually employed to this end. (1-2) The last investigation for the NQM of xenon  $^{131}\text{Xe}$  was performed with the molecular method by Kellö et al. (3) in 2001. These authors used data of two molecules ( $\text{XeH}^+$  and  $\text{XeD}^+$ ) and two-component coupled cluster (CC) calculations. In this study we provide a new determination of the NQM for  $^{131}\text{Xe}$  using a more enhanced formalism, a high level electronic structure calculation (CCSD-T) and experimental data of six molecules ( $\text{XeH}^+$ ,  $\text{XeCuF}$ ,  $\text{XeCuCl}$ ,  $\text{XeAgF}$ ,  $\text{XeAgCl}$  and  $\text{XeAuF}$ ).

**Keywords:** Nuclear quadrupole moment. Xenon. Molecular method.

### Referências:

1 PYYKKÖ, P. Spectroscopic nuclear quadrupole moments. **Molecular Physics**, v. 99, n. 19, p. 1617-1629, 2001.

2 PYYKKÖ, P. Year-2008 nuclear quadrupole moments. **Molecular Physics**, v. 106, n. 16-18, p. 1965-1974, 2008.

3 KELLÖ, V.; PYYKKÖ, P.; SADLEJ, A. J. Nuclear quadrupole moments of Kr and Xe from molecular data. **Chemical Physics Letters**, v. 346, n. 1-2, p. 155-159, 2001.





## IC8

# Uso da TIC nos anos finais do Ensino Fundamental: oito anos de trajetória e parceria

NAVASCUES, F. F.<sup>1</sup>; BORTOLETTO-SANTOS, R. C.<sup>1</sup>; COLNAGO, N. A.<sup>2</sup>; MASCARENHAS, Y. P.<sup>1</sup>

nacolnago@gmail.com

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

<sup>2</sup>Instituto de Estudos Avançados - USP

**Objetivos** O objetivo deste trabalho de pesquisa é relatar a experiência e o resultado da parceria realizada por integrantes do Instituto de Estudos Avançados IEA/USP-Pólo São Carlos, com três escolas públicas estaduais, da cidade de São Carlos/SP, no período de oito anos (2008-2015), com base na possibilidade do uso das tecnologias da informação e comunicação (TIC) como recurso didático agregado ao trabalho do professor com temas geradores. **Métodos e Procedimentos** A parceria do IEA /USP/São Carlos e Escolas Públicas, dá-se em 2008, com o objetivo de apresentar o recém-criado Portal ciência web e fazer a divulgação e a difusão científica nas escolas. Workshops de informática básica foram oferecido para os professores. A professora de Ciências, da E E Jesuíno de Arruda gostaria de socializar essa experiência com os alunos. Estávamos diante de um desafio devido as turmas numerosas e a alternativa, de oferecer uma atividade diferente das aulas tradicionais. A pesquisadora do IEA/USP abraçou a ideia, se propondo a auxiliar no planejamento e execução de atividades envolvendo as TIC. Buscou-se aprimorar o conhecimento técnico e pedagógico dos professores, a partir de temas relacionados à disciplina de Ciências nos anos finais do ensino fundamental de modo multidisciplinar. Os projetos envolveram três escolas, 727 alunos, oito professores, de cinco disciplinas (Ciências, Língua Portuguesa, Educação Física, História e Matemática); a coordenadora de projetos do IEA/ São Carlos e 13 bolsistas de Iniciação Científica dos cursos de Licenciatura em Ciências Exatas, Jornalismo e Ciência da Computação. **Resultados** Foram produzidos 15 trabalhos acadêmicos apresentados em eventos nacionais e internacionais; 13 CD-ROM e 2 jornais digitais (Gazeta Álvaro Guião e Attília News). Destacam-se os projetos de pesquisa desenvolvidos nas três escolas: E.E. Jesuíno de Arruda, Nosso Céu (2009); Sustentabilidade: alternativas para o futuro encontradas no passado (2010); A Química no cotidiano (2011); A Ciência explicada em cordel (2012); na E.E. Dr. Álvaro Guião, Água, recurso natural indispensável à vida (2013) e Água - reutilizar para não faltar (2014) e na E. E. Attília Prado Margarido Micro bioma Humano (2014/2015). **Conclusões** O desenvolvimento de projetos com temas geradores se mostrou eficiente. Há necessidade em investir na formação dos professores para o uso das novas tecnologias (na graduação ou na formação continuada). O uso das TIC produz uma aprendizagem mais significativa e prazerosa, aumentando a motivação dos alunos. A parceria universidade-escola e o envolvimento de bolsistas da USP foi importante para o projeto devido ao grande número alunos por classe.(1) **Agradecimentos:** FAPESP, CNPq e FIPAI

**Palavras-chave:** TIC. Temas geradores. Ensino publico.

**Referências:**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

1 PRAIS, J. L. S.; REIS, J. I. V.; DUTRA, A. O uso das TIC no contexto educacional: a formação docente frente às novas tecnologias. **Revista Tecnologias na Educação**, v. 13, n. 7, p. 1-3, 2015.



## IC9

# Manipulação de campos magnéticos em sistemas de átomos frios e condensados de Bose-Einstein

DIAS, P. G. S.<sup>1</sup>; HENN, E. A. L.<sup>1</sup>

pablo.dias@usp.br

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

O objetivo principal deste projeto de Iniciação Científica foi estudar a geração, manipulação e controle de campos magnéticos envolvendo átomos em diversas escalas de temperaturas próximas a 0 Kelvin. Além disso, foram realizados testes e desenvolvimentos de sistemas para outras etapas do experimento que visa a produção de um Condensado de Bose-Einstein (1) de duas espécies ( $^{23}\text{Na}$  e  $^{41}\text{K}$ ). Como por exemplo controles de acoplamento para fibras ópticas e testes envolvendo antenas para micro-ondas. Um dos testes mais importantes envolvendo a geração de campos magnéticos realizado durante o projeto foi o teste de resfriamento de um par de bobinas que serão usadas no experimento para geração de campos magnéticos que sintonizarão as ressonâncias de Feshbach. (2-3) No desenvolvimento do controle de acoplamento foram utilizados fotodetectores fabricados com esquema desenvolvido em nosso laboratório de instrumentação eletrônica (LIEPO). Os testes envolvendo antenas de micro-ondas foram necessários em busca de uma nova maneira de realizar o resfriamento evaporativo do Sódio sem que o Potássio seja afetado. Foi feito um estudo prévio sobre qual a melhor forma de efetuar o resfriamento evaporativo em cada espécie individualmente. Uma vez determinado quais intervalos de Radio-frequência podem ser utilizadas, foram feitos testes verificando qual o acoplamento, e emissão como função do diâmetro da antena. Assim, embora medidas de caracterização de radio-frequência sejam difíceis de serem executadas por serem muito interagentes, foram encontrados indícios de que o melhor diâmetro é aquele no qual o perímetro corresponde ao comprimento de onda da radiação que se deseja acoplar, lembrando da correção para a velocidade de propagação do sinal em meios materiais.

**Palavras-chave:** Condensados de Bose Einstein. Átomos frios. Manipulação de campos magnéticos.

### Referências:

- 1 HENN, E. A. L. et al. Bose-Einstein condensation in 87Rb: characterization of the brazilian experiment. **Brazilian Journal of Physics**, v. 38, n. 2, p. 279-286, 2008.
- 2 CHIN, C. et al. Feshbach resonances in ultracold gases. **Review of Modern Physics**, v. 82, n. 2, p. 1225-1286, 2010.
- 3 INOUE, S. et al. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. **Nature**, v. 392, n. 6672, p. 151-154, 1998.



## IC10

# The ontology of Faraday's lines of force: a historical analysis

FERREIRA, C. T. T.<sup>1</sup>; SILVA, C. C.<sup>1</sup>

ciro.ferreira@usp.br

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

It was done an analysis of the different interpretations of Michael Faraday (1791 - 1867) about the concept of lines of force through the Experimental Researches in Electricity concerning its ontology. This book presents the experimental works of Faraday about electricity between 1831 and 1851. In this book he uses the concept of lines of force in different contexts with different meanings, without necessarily making clear if he considers the lines as real entities or if he uses them only as useful tools. The evolution of Faraday's view on the lines of force in this work was analyzed, taking into account the reasons that lead him to believe in the reality of those. It was also analyzed the different perspectives of historians and philosophers towards the question "what was Faraday's field concept?". (1) That was useful because there is not a consensual position on the issue, and each context in which the lines are used can have a different ontology attached to it.

**Keywords:** History of physics . Michael Faraday. Lines of force.

### Referências:

1 NERSESSIAN, N. Faraday's field concept. In: GOODING, D. **Faraday rediscovered** . New York: American Institute of Physics, 1989. p. 175-188



## IC11

### Microlites structure refinement

GARCIA, G. S.<sup>1</sup>; ANDRADE, M. B.<sup>1</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

gabriel2.garcia@usp.br

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

Characterization of mineral species plays an important role in development of better inorganic materials. (1) For instance, improvements in physical properties of a material may be result of a better comprehension of its structure. This work focuses on rare minerals, due to their extensive adhibition as source of feedstock for industry. Despite its large reserves and wide geological variety, Brazil has only 65 mineral types, that is, valid mineral species first described here. (1) Then, as part of CCEM efforts, we also aim to describe new mineral species. Part of pyrochlore's supergroup, microlites differ from others because of tantalum presence in their structure. (2) Structure refinement of a microlite is described hereafter. Single-crystal X-ray diffraction was used to obtain data of the mineral. This technique requires a careful sample preparation. It includes finding a good shape and small (about 100 micrometers) single-crystal. Bad shape samples may mean absorption effects difficult to be corrected, that is, low quality data. After an appropriate sample preparation, the sample was posicioned in a Kappa CCD Enraf-Nonis (Mo  $K\alpha$   $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ ) diffractometer, which discharged X-ray beams towards the sample, and also detected the reflections through a charge-coupled device (CCD). After all necessary corrections, the sample's unit cell was determined. This information and data about all the reflections are very important to the refinement. Using both and the software WinGX, an archive hkl was generated. Structure refinement using SHELX and SHELXL (3) software is made with 4 text archives: *hkl*, *ins*, *res* and *lst*. The first contains data related to the reflections, and the second, information that are supposed to belong to the sample, as chemical elements, their proportions and positions, dimensions and temperature. These archives are used as input in SHELXL. The third archive contains all information about the refinement model with updated crystallographic parameters and auxiliary parameters, as structure factor (F) and goodness of fit (GooF). The nearer to 1 is GooF, nearer are the theoretical reflections to the experimental ones. It means that the supposed structure of the sample is right. The fourth archive contains more detailed information about the structure, including the chemical bonds and total electrons, which can also be used as aid. *res* and *lst* archives are SHELXL's outputs. The structure refinement is purely an iterative process, which is traveled by modifying the inputs until convergence. After the structure refinement, an *cif* archive is generated, and it can be used to the structure graphic visualization and publications. Given the possibility of finding new microlite mineral species (2), new studies will be developed aiming to perform the structure refinement of another microlites species.

**Keywords:** Crystallography. X-ray diffraction. Rare minerals.

#### 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.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 ATENCIO, D. et al. The pyrochlore supergroup of minerals: nomenclature. **Canadian Mineralogist**, v. 48, n. 3, p. 673-698, 2010.

3 SHELDRIK, G. M. A short history of SHELX. **Acta Crystallographica A**, v. 64, n. 1, p. 112-122, 2008.



## IC12

### Lacase: caracterização, estudos estruturais e funcionais

GREJO, M. P.<sup>1</sup>; MUNIZ, J. R. C.<sup>1</sup>

mateus.grejo@usp.br

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

As lacases são oxidorreduções multicobre dependentes, estas enzimas catalisam a oxidação de um elétron de uma ampla variedade de substratos orgânicos e inorgânicos, incluindo monofenóis, difenóis, e polifenóis, aminofenóis, metoxifenóis, aminas aromáticas e ascorbato, com a concomitante redução de quatro elétrons do oxigênio à água. (1) A principal motivação deste projeto foi o estudo da atividade de deslignificação de lignina pela lacase. A lignina é um polímero polifenólico constituinte da parede celular vegetal, que reveste as camadas de celulose e hemicelulose. A lacase catalisa a oxidação cobre dependente dos fragmentos fenólicos da lignina, concomitantemente a deslignificação. Esta atividade é extremamente interessante para o processo de produção de biocombustíveis, principalmente o etanol de segunda geração e também para o reaproveitamento da biomassa vegetal que sobra nas usinas (constituída majoritariamente por lignina); com a aplicação de lacases como enzimas auxiliares em coquetéis enzimáticos. Com isso, a caracterização da atividade desta lacase putativa é de grande importância para avanços nos estudos para a obtenção de biocombustíveis a partir de fontes renováveis, com a parede celular de plantas, em especial a cana de açúcar, cujo maior produtor do mundo é o Brasil. Durante o programa de iniciação científica foram realizados procedimentos de biologia molecular para a expressão da proteína em estudo, seguido de procedimentos cromatográficos para sua purificação. Com a proteína pura foram realizados ensaios de atividade enzimática, com um substrato específico para enzimas oxidativas (ABTS) e também com vários possíveis substratos oligossacarídeos, com o objetivo da caracterização funcional da enzima. A estrutura cristalográfica desta proteína foi resolvida pelo meu orientador João Renato C. Muniz pelo método de cristalografia de raios X, em resolução de 2,49 Å. A partir dos resultados dos ensaios de atividade enzimática pôde-se concluir que a enzima não apresenta atividade oxidativa com o substrato ABTS e também não apresenta atividade hidrolítica com os polissacarídeos utilizados no painel de substratos. Com isso conclui-se que a enzima não é uma lacase verdadeira e sua atividade catalítica ainda não foi caracterizada.

**Palavras-chave:** Lacase. Oxidorredução. Lignina.

#### Referências:

1 MADHAVIA, V.; LELE, S. S. Laccase: properties and applications. **BioResources**, v. 4, n. 4, p. 1694-1717, 2009.



## IC13

# Characterization and control system of a magnetic field for tuning the Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate

MAZO, P. L.<sup>1</sup>; FARIAS, K. M.<sup>1</sup>; GUTIERREZ, E. M.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; CASTILHO, P. C. M.<sup>1</sup>; DIAS, P. G. S.<sup>1</sup>; PEÑAFIEL, E. E. P.<sup>1</sup>

pedrolmazo@gmail.com

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

The production of a Bose-Einstein condensate in a pure optical trap allows the utilization of Feshbach resonances to switch the interactions between atoms.(1) The objective of the project was the characterization of the magnetic field and the characterization of the system responsible for cooling the coils that are responsible for tuning the Feshbach resonances. For the characterization of the magnetic field a Hall Probe was fixed in a mounting that allows to translate it along the axis that connect the center of the coils, where we measure the field. For the cooling tests, we connect one of the coils in a chiller that pumped water continuously and maintains it cold (14°C). For several currents we checked the temperature over time. The magnetic field produced by the pair of coils is a Helmholtz field, symmetrical and uniform in a small interval in the center, ideal for experimental purposes. The cooling tests showed that, for low currents, the temperature tends to stabilize, while for higher currents we see only the beginning of the stabilization, showing that for 30 seconds, an overestimated time, the maximum temperature was 45 degree Celsius, a temperature that was still safe to work (in a certain amount of time) without damaging the coils. After checking that the magnetic field of the coils was symmetrical and uniform in the center as we expected and that the efficiency of the cooling system was suitable for the experiment, it was possible to conclude that the pair of coils responsible for tuning the Feshbach resonances was ready to be inserted in the experiment.

**Keywords:** Bose-Einstein. Resonances. Condensate.

### Referências:

1 INOUE, S. et al. Observation of Feshbach resonances in a Bose Einstein condensate. **Nature**, v. 392, n. 6672, p. 151-154, 1998. doi: 10.1038/32354.





## IC14

# Planejamento racional, síntese supramolecular e caracterização de novas formulações sólidas de fármacos utilizados no tratamento de doenças negligenciadas

MEDINA, A. C. Q. D.<sup>1</sup>; CARVALHO JUNIOR, P. S.<sup>2</sup>; ELLENA, J. A.<sup>2</sup>

ana.carolina.medina@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

**Objetivos** Desenvolver novas formas sólidas da DEC pura com ácidos orgânicos e caracterizá-las por estudos espectroscópicos e termodinâmicos utilizando Microscopia Hot Stage (HSM), Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC), Termogravimetria (TGA), e Espectroscopia Vibracional na Região do Infravermelho por Transformada de Fourier (FT-IR). **Métodos e Procedimentos** Os principais reagentes utilizados foram a Dietilcarbamazina (DEC), os Ácidos Maleico, Fumárico, Oxálico, Benzóico, Succínico, Rosólico, Tereftálico, Trimésico e Tricloroacético. Para o processo de cristalização, pesou-se 5 mg da DEC pura, sendo essa massa dissolvida em 0,1 mL de etanol/água (1:1) ou de isopropanol. Em seguida, foi pesada e adicionada ao sistema a quantidade dos ác. orgânicos com relação estequiométrica proporcional. O sistema foi submetido à agitação magnética até total dissolução dos sólidos e o recipiente foi mantido sob diferentes temperaturas, -2 e 25 °C, por cerca de três dias ou até evaporação total do solvente. **Resultados** - Condições ótimas de cristalização: DEC com os Ácidos Maleico, Fumárico e Oxálico no solvente isopropanol para os dois primeiros e em ambos os sistemas para o último, nas temperaturas de -2 e 25 °C. - Dados da fusão dos precursores e dos co-cristais -por HSM: DEC: 47-48 °C (1); Ác. Maleico: 139 °C (2); Ác. Fumárico: 187 °C (2); Ác. Oxálico: 189,5 °C (2); DECMAL: 120-132 °C; DECFUM: 112-124 °C; DECOXA: 119-124 °C. - Quando comparados os termogramas de DSC/TGA para os co-cristais obtidos, observou-se uma diferença em relação aos termogramas dos precursores. - Os espectros de FTIR dos co-cristais apresentaram bandas referentes aos estiramentos das ligações dos precursores, indicando que estes estavam presentes na estrutura cristalina. **Conclusões** As análises térmicas e espectroscópicas mostraram que os cristais formados são novas formulações sólidas distintas dos sólidos utilizados no processo de cristalização.

**Palavras-chave:** Formas sólidas. Síntese. Caracterização.

### Referências:

- 1 SILVA, C. C. P. **Caracterização de estado sólido de insumos farmacêuticos ativos: clorpropamida, nevirapina e dietilcarbamazina.** 2010. 185p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 2 LIDE, D. R.. **CRC handbook of chemistry and physics.** 87th ed. Boca Raton: CRC Press, 2006. p. 264-322



## IC15

# The light automated measurement strategy at a plant controlled growth chamber

MERENDA, J. V. B. S.<sup>1</sup>; ALMEIDA FILHO, H. A.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

joao.merenda@usp.br

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

One way to measure the amount of light in an environment is using a photo-conductive cell, which receive the light that performs an alteration in its electrical properties. Some studies have reported this type of measurement of light associated with automated measurement of voltage by microcontrollers. (1) In this study we used an LDR sensor (Light Dependent Resistor) for measuring illuminance in lux in a controlled growth chamber through a linear relationship between the resistance (Ohm) of the LDR and the illuminance (lux), so that the higher the illuminance (I) lower resistance (R), as seen in the following equation:

$$R = m.I + b$$

Where m is the slope and b the linear coefficient of the curve. From measurements with a device that computes illuminance (Luxometer) and automated measurement of the potential difference (ddp) between the terminals of the LDR sensor with a microcontroller atmega 328p, we constructed a curve relating the measures illuminance and ddp similar to the standard curve for the sensor. Thus the potency relating the irradiance of the light flux in a certain area within the controlled growth chamber can be calculated according to the ddps obtained according to the following equation:

$$p = v^2/R$$

Where P is power, V is ddp and R is resistance. The environment where the light was measured was a plant controlled growth chamber, for this reason the molar flow rates of photons had to be calculated based on the illuminance measured on the sensor area, since these data are relevant in estimating the photosynthesis rates, for this, the Planck equation estimates the number of irradiated photons on this area:

$$E = h.f$$

Where E is the energy of one photon, h is the Planck's constant, and (f) is the value of the average frequency of the transmitted light.

**Keywords:** Automated. Light. Chamber.

### Referências:

1 BARRIQUELLO, C. H. et al. Sistema inteligente baseado em Zigbee para iluminação pública com lâmpadas de LEDs. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE AUTOMÁTICA, 17., 2008, Juiz de Fora. **Anais...** Porto Alegre: Sociedade Brasileira de Computação - SBC, 2008.



## IC16

# Caracterização de uma hidrolase de glicosídeo (XCC3535) de *Xanthomonas campestris*

NAKADA, P. J. T.<sup>1</sup>; TOMAZINI JÚNIOR, A.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

paulo.nakada@usp.br

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

Em virtude da constante busca por qualidade de vida e saúde, têm-se aumentado a necessidade de alimentos com valor nutricional adequado e baixo valor calórico, como os xilooligossacarídeos importantes nas atividades funcionais exercidas por organismo probióticos, por exemplo, as bactérias lácticas. (1) Diante disso, temos como objetivo a caracterização funcional de uma hidrolase de glicosídeo de *Xanthomonas campestris* (XCC3535), cuja ação enzimática consiste na liberação de xilooligossacarídeos. Inicialmente o gene de interesse foi amplificado pelo método de reação em cadeia da polimerase (PCR) a partir do DNA genômico de *Xanthomonas campestris*, utilizando oligonucleotídeos específicos. Em seguida, o gene foi inserido no vetor pSMT3 e propagado em células *E. coli* DH5 $\alpha$ , por fim inseridos em células de expressão *E. coli* Rosetta. (2) Com isso, iniciou-se o processo de expressão heteróloga da proteína e sua caracterização funcional. A proteína codificada por este gene foi purificada utilizando cromatografia de afinidade com resina Ni-NTA (Qiagen), o grau de pureza avaliado em gel SDS-PAGE e quantificada utilizando espectrofotômetro NanoDrop® 2000 (Thermo Scientific). A mesma, foi submetida a ensaios enzimáticos para determinar as melhores condições funcionais (substrato, temperatura e pH), e tempo de saturação. Por fim, utilizando o sistema de cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) (ICS 5000 Dionex) foi analisada a liberação de oligossacarídeos. Os resultados para expressão e purificação da proteína foram avaliados em gel de poliacrilamida 15%, sendo que a mesma apresentou um rendimento médio de 16 mg para cada litro de meio de cultura. Quanto à caracterização de atividade, as melhores condições foram: pH 5, 60°C sobre arabinoxilano de centeio, sendo o tempo de saturação da atividade 8 horas. A partir do cromatograma de liberação de produtos da ação enzimática sobre arabinoxilano de centeio foi obtido o perfil de atividade identificando-se xilooligossacarídeos de X1 a X6, intermediários a estes e maiores a X6. De acordo com estes resultados, a caracterização funcional obteve êxito, identificando as melhores condições de ação para esta arabinoxilanase, que libera xilooligossacarídeos com variado grau de polimerização. Tais açúcares têm importantes aplicações nas indústrias alimentícias e farmacêuticas, evidenciando que a enzima em estudo é uma potencial ferramenta de aplicação biotecnológica.

**Palavras-chave:** Arabinoxilano. Xilooligossacarídeos. *Xanthomonas campestris*.

### Referências:

- 1 MENEZES, C. R.; DURRANT, L. R. Xilooligossacarídeos: produção, aplicações e efeitos na saúde humana. **Ciência Rural**, v. 38, n. 2, p. 587-592, 2008.
- 2 TOMAZINI JÚNIOR, A. **Caracterização estrutural da glicosilhidrolase de *Xanthomonas***



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**campestris contendo os domínios: catalítico da família GH5 e semelhante à expansina.** 2012. 143 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.



## IC17

# Study about the possibility of indirect detection of dark matter

NAKASHIMA, D. K.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

kaoriinakashima@gmail.com

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

**Objective** The goal of the present project consists in studying the fundamental questions on dark matter: evidence, feature and detection. It is known that several properties about dark matter can be inferred from N-body computational simulations. Therefore, in order to understand the basic features and difficulties of these algorithms I implemented a similar program to simulate the dynamics of a few bodies under gravitational force. **Materials and Methods** In the theoretical part of this project I studied: the evidence of dark matter (1), the detection mechanisms and recent results concerning indirect detection. The source of the study was books and articles. In practice part of this project, I developed a program to simulate the gravitational interaction of a few bodies. My implementation was based on the Euler method to solve differential equation. I compared my implementation to a professional algorithm found on reference (2). **Results** Many evidences of dark matter were studied in galactic and cosmologic scales. One class of experiments searches for indirect detection of dark matter. We assume that dark matter particles are WIMPs (Weak Interactive Massive Particles), hypothesized by Supersymmetric Standard Model. In this procedure, the dark matter particles annihilates themselves and form measurable final products, such as gamma rays. A recent search (3) (2016, May), using Fermi-LAT Observatory data, shows an excess in gamma radiation flux from galactic center. The result is inconclusive yet, but one of the hypothesis is the dark matter annihilation. In the practice part, I created a few bodies simulation through Euler method, where particles attract other particles by Gravitational law of Newton. This method, however, do not assure convergence. The step-size, an important variable to assure convergence, was studied carefully. Many tests about it were done and the result is the algorithm, created by me, is able to assure convergence of few particles with limited number of interaction. To solve this question, I studied the algorithm and compared it to an algorithm proposed in reference (3). The main difference between the two implementations the smooth continuity of the force step-by- step and the individual time-step. The implementation of this new algorithm is not yet finished. **Conclusions** Despite many studies and results that shows dark matter existence, until now no one can claim what are its elementary blocks (particles). In short, dark matter has much to be studied. In the theoretical part, meanwhile, it is worth all the progress gained through the created program and the study of particle convergence.

**Keywords:** Dark matter. Indirect detection. N-body simulation.

### Referências:

- 1 ZWICKY, F. On the masses of nebulae and of clusters of nebulae. **Astrophysical Journal**, v. 86, n. 3, p. 217-246, 1937.
- 2 AARSETH, S. J. Predictor-corrector methods. In: AARSETH, S. J. **Gravitational N-body**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**simulations:** tools and algorithms. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2003. 18-31 p.

3 CHARLES, E. et al. Sensitivity projections for dark matter searches with the *Fermi* large area telescope. **Physics Reports**, v. 636, p. 1-46, 2016. doi: 10.1016/j.physrep.2016.05.001.



## IC18

# Expressão, purificação e caracterização de atividade hidrolítica de hidrolase de glicosídeo

ROCHA, T. S.<sup>1</sup>; MERA, A. E. M.<sup>1</sup>; LIMA, M. Z. T.<sup>2</sup>; MUNIZ, J. R. C.<sup>1</sup>

tamiris.rocha@usp.br

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

<sup>2</sup>Universidade Presbiteriana Mackenzie - UPM

Este trabalho tem como finalidade a expressão e a purificação da sacarose-6-fosfato hidrolase de *Bacillus licheniformis* - BIAgh32 - pertencente à família GH32 das hidrolases de glicosídeo (1), em com a finalidade de encontrar as condições ótimas (pH e temperatura) para a sua hidrólise de sacarose. (2) O gene codificador da proteína-alvo foi clonado através do método *Ligation-Independent Cloning* (LIC) (3) e expresso em células procaríotas *E. coli* Rosetta. A proteína foi purificada por cromatografia de afinidade em coluna de  $Ni^{2+}$  (1,3), na qual foi adicionada uma etapa adicional de lavagem, com uma solução contendo 300 mM de imidazol, para eluição da proteína de interesse. Em seguida, a cauda de histidinas fusionada foi clivada pela protease TEV (1), para então ser separada da cauda por uma segunda purificação em coluna de  $Ni^{2+}$ . Em seguida foi efetuada uma purificação por cromatografia de exclusão de massa molecular. (1) Estes passos foram analisados em gel de poliacrilamida 10%. Obtida a proteína pura verificou-se sua atividade hidrolítica na presença de sacarose, fixando pH e variando temperatura, e vice-versa, para determinação das condições reacionais mais eficazes. A análise da hidrólise foi feita utilizando o método DNS. (2) Estas medidas foram analisadas através dos gráficos resultantes da espectrofotometria. A lavagem adicional durante a purificação diminuiu a perda da BIAgh32 que ainda aparecia nos géis com a amostra de limpeza da coluna. Quanto aos estudos da hidrólise em relação aos parâmetros a maior estabilidade enzimática, foi obtido 5,5 para pH a 30°C, e pra condições ótimas, pH a 6,0 a 33,6°C. De fato, a metodologia de expressão e purificação adotados foram satisfatórios para a purificação da BIAgh32, e os estudos reacionais permitiram a sua caracterização hidrolítica, acrescentando informações aos estudos com hidrolases de glicosídeo.

**Palavras-chave:** Hidrólise sacarose. Frutossiltransferase. Método DNS.

### Referências:

- 1 LIMA, M. Z. T. **Estudos funcionais e estruturais de enzimas frutossiltransferases das famílias 32 e 68 de hidrolases de glicosídeos.** 2015. 157 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.
- 2 ZHAO, K.; XUE, P.-J.; GU, G.-Y. Study on determination of reducing sugar content using 3, 5-dinitrosalicylic acid method. **Food Science**, v. 29, n. 8, p. 534-536, 2008.
- 3 CAMILO, C. M.; POLIKARPOV, I. High-throughput cloning, expression and purification of glycoside



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

hydrolases using Ligation-Independent Cloning (LIC). **Protein Expression And Purification**, v. 99, p. 35-42, 2014. doi: 10.1016/j.pep.2014.03.008.





## IC19

# Study of organic molecules (perylene) for applications in laser-active medium

SCIUTI, L. F.<sup>1</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>

lucas.sciuti@usp.br

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

The search for new materials as active medium for the manufacture of tunable lasers is still very important. Organic molecules with high fluorescence quantum yield and broadband emission are desired for being used as optical medium. Within this family of organic materials, perylene are organic compounds with interesting optical properties, such as intense absorption and emission in the visible region of the electromagnetic spectrum. (1) The main objective of this project was to study organic molecules (dyes) to be used as a laser-active medium. (2) In addition, other objectives have been achieved, such as the construction of an optical cavity, the calibration of it using a standard dye (Rhodamine B) and the study of a new dye, in this case the PTCD-Bu perylene as the active media. In this study, concepts as absorption, fluorescence, stimulated and spontaneous emission and fluorescence lifetime were explored. For the study and characterization of the active medium for dye laser, a pumping laser operating at 532 nm (within the absorption band of the dyes) was used, keeping a repetition frequency of 20 Hz to avoid possible degradation. The Rhodamine B solution (RdB) dissolved in ethanol and PTCD-Bu dissolved in 10% trifluoroacetic acid (TFA) and 90% dichloromethane (DCM) were made at a concentration of about 10<sup>-3</sup> Molar. These solutions were placed in cuvettes with 1 cm optical path, which was inserted between the mirrors of the cavity. The dye lasers emission spectrum measurements were made according to the power of the pump laser. In addition, the emission features such as bandwidth emission, lifetime, etc. were observed. The PTCD-Bu laser emission characteristics such as the decrease in the width of emission, reduction of fluorescence lifetime and growth of the laser emission as a function of pump power have been observed, showing a laser action compared to the RdB, one of the best dye for laser-active medium. Also, it was noticed a double emission peak for the PTCD-Bu, allowing the tuning of different wavelengths.

**Keywords:** Laser dye. Perylene. Spectroscopy.

### Referências:

1 IVRI, J. et al. The perylene derivative BASF-241 solution as a new tunable dye laser in the visible . **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 9, p. 1516-1520, 1990. doi: 10.1109/3.102629.

2 DUARTE, F. J. et al. **Dye laser principles**: with applications. San Diego: Academic Press, 1990. 456 p.



## IC20

# Caracterização dos agrupamentos neurais da amígdala envolvidos na reinstalação induzida por contexto da autoadministração de etanol por ratos

TAVARES, L. C.<sup>1</sup>; LEAO, R. M.<sup>2</sup>; BIANCHI, P.<sup>3</sup>; PALOMBO, P.<sup>3</sup>; PLANETA, C. da S.<sup>3</sup>

leticia.tavares@usp.br

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

<sup>2</sup>Instituto de Ciências da Saúde - UFBA

<sup>3</sup>Escola de Ciências Farmacêuticas - UNESP

Frequentemente, a recaída ao uso de drogas por usuários abstinentes é atrelada à exposição ao contexto ambiental associado ao uso da substância de abuso. Estudos demonstram que essas associações entre o ambiente e o uso de drogas são armazenadas por pequenos grupos neurais seletivamente ativados que estão distribuídos por diferentes regiões encefálicas e conectados entre si através de sinapses fortes. (1-3) Assim, no presente estudo investigamos se a reinstalação da autoadministração de etanol induzida pelo ambiente é mediada pela ativação de grupamentos neurais presentes na amígdala. Para isso, ratos foram treinados a autoadministrarem etanol (10%), 1 hora/dia, durante 16 dias, em um determinado ambiente (Contexto A). A entrega de etanol foi mediada pela pressão de uma barra e associada a dicas discriminativas audiovisuais (tom e luz). Em seguida, esse comportamento foi extinto por 10 dias na presença das dicas discriminativas em um ambiente (Contexto B) distinto do contexto associado à droga em termos sensoriais. Durante a fase de extinção, a pressão na barra ativa não foi mais reforçada pela liberação de etanol. Subsequentemente, os ratos foram reexpostos ao Contexto A, previamente associado ao uso de etanol, ou ao Contexto B (como forma de controle), durante 60 minutos nas mesmas condições da fase de extinção, para avaliação da capacidade do ambiente em reinstalar a busca por etanol. Os grupamentos neurais na amígdala ativados durante a reinstalação da autoadministração de etanol induzida pelo contexto foram identificados usando a técnica imunohistoquímica de Fos, marcador de ativação neural. Também determinamos a proporção de neurônios ativados na amígdala através da dupla marcação com Fos e o marcador específico de células neurais NeuN. Adicionalmente, realizamos a quantificação da porcentagem de interneurônios dos tipos colinérgicos e gabaérgicos na amígdala que foram ativados durante a reinstalação da autoadministração de etanol induzida por contexto, através da dupla marcação ChAT (anti-colina acetiltransferase) e NeuN e PV (parvalbumina) e NeuN, respectivamente. Identificamos que a reexposição ao contexto associado ao etanol (Contexto A), mas não ao contexto de extinção (Contexto B), aumentou o número de pressões na barra (pressões na barra:  $22 \pm 3$ , Contexto A e  $7 \pm 3$ , Contexto B;  $p < 0.05$ ). No entanto, a imreatividade à Fos na porção basolateral da amígdala aumentou tanto no Contexto A quanto no Contexto B: (Células positivas para Fos; Basolateral:  $124,2 \pm 14.99$  Contexto A e  $138.88 \pm 20.2$  Contexto B). Na porção central da amígdala, a imreatividade à Fos só aumentou no Contexto B: (Células positivas para Fos; Central:  $81.9 \pm 9.11$  Contexto A e  $122.01 \pm 14$  Contexto B;  $p < 0.05$ ). A porcentagem de ativação neural nos Contextos A e B na amígdala central e basolateral foram: 0.4%, e 1.0%; 1.6% e 1.8%, respectivamente. Dentre os neurônios que foram ativados,



as porcentagens de neurônios colinérgicos e gabaérgicos, por contexto, foram: (Contexto A: 49,62% colinérgicos e 13,74% gabaérgicos; Contexto B: 55,10% colinérgicos e 21,09% gabaérgicos). Esses dados sugerem que a ativação de pequenos grupos de neurônios na amígdala, formados principalmente por neurônios dos tipos colinérgicos e gabaérgicos, pode estar associada tanto à extinção quanto à reinstalação da autoadministração de etanol.

**Palavras-chave:** Dependência ao etanol. Neuropsicofarmacologia. Farmacodependência.

#### **Referências:**

- 1 SCHUSTER,, C. R.;THOMPSON, T . Self-administration of and behavioral dependence on drugs. **Annual Review of Pharmacology** , v. 9, p. 483-502, 1969. doi: 10.1146/annurev.pa.09.040169.002411.
- 2 CARELLI, R. M . The nucleus accumbens and reward: neurophysiological investigations in behaving animals. **Behavioral and Cognitive Neuroscience Reviews** , v. 1, n. 4, p. 281-296, 2002. doi: 7712985.
- 3 REBEC, G. V. ; SUN, W. Neuronal substrates of relapse to cocaine-seeking behavior: role of prefrontal cortex. **Journal of the Experimental Analysis of Behavior**, v. 84, n. 3, p. 653-666, 2005. doi: 10.1901/jeab.2005.105-04.



## IC21

# Montagem de um laser diodo de cavidade extendida e sintonizável em configuração Littrow

TODÃO, F. R.<sup>1</sup>; COURTEILLE, P. W.<sup>2</sup>

fagner.todao@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos – USP

Os lasers diodo de cavidade extendida (ECDLs, sigla para *External Cavity Diode Lasers*) apresentam uma vasta aplicação na área de óptica e de física atômica, devido à possibilidade de se alcançar propriedades de emissão altamente controláveis. Além disso, possuem a vantagem da utilização de diodos laser de baixo custo e eficientes. (1-3) Tendo esses aspectos em vista, propõe-se o *design* e a construção de um ECDL na configuração Littrow (que propicia maior eficiência e potência do feixe de saída) para o acoplamento de um diodo laser que possui máxima intensidade de emissão ao redor de 405 nm. Esse laser será posteriormente utilizado no experimento de resfriamento e aprisionamento de átomos de estrôncio. O *design* da cavidade foi projetado no *software SolidWorks* e será confeccionado na oficina mecânica do IFSC. Além disso, a cavidade será feita de acrílico transparente que promove melhor isolamento térmico do que o metal e possibilita a visualização da parte interna da cavidade sem a necessidade de desmontagem. Em seguida, a cavidade será montada, os componentes serão integrados dentro desta (diodo laser, grade de difração, piezoelétrico, regulador termoelétrico e termistor) e serão feitas caracterizações quanto à estabilidade da frequência, largura de linha e potência do feixe de saída. Um primeiro ECDL fora projetado, porém apresentou alguns problemas de falta de espaço para acomodação dos componentes na cavidade e instabilidade no condicionamento térmico, na corrente de alimentação do diodo laser e na frequência. Na expectativa de contorná-los, a cavidade projetada possuirá maior espaço, melhoria na disposição das aberturas para os conectores e para a saída do feixe, melhoria no acesso aos parafusos de regulação e tentativa de contorno do problema de pulos de modos pela possibilidade de variação da posição da grade de difração numa grande extensão dentro da cavidade.

**Palavras-chave:** Laser. Cavidade. Estabilização.

### Referências:

1 SALIBA, S. D. et al. More stability of external cavity diode lasers. **Applied Optics**, v. 48, n. 35, p. 6692-6700, 2009.

2 HONG, W. **Design and characterization of a littrow configuration external cavity diode laser**. Disponível em: <<http://web.mit.edu/rsi/compendium/edit2004/Final/hong-wenxian-caltech-both.pdf>>. Acesso em: 30 ago. 2016.

3 COOK, E. C. et al. High passive-stability diode-laser design for use in atomic-physics experiments.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Review of Scientific Instruments**, v. 83, n. 4, p. 043101, 2012. doi: 10.1063/1.3698003.



## IC22

# Uma nova proposta para visualização e discussão do experimento de ondas sonoras em tubos

WANDERLEY, A. B.<sup>1</sup>; PIZETTA, D. C.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>1</sup>; MASTELARO, V. R.<sup>1</sup>

adilson.wanderley@usp.br

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

Este trabalho tem como objetivo a análise e discussão do experimento do tubo de ondas sonoras(1) por meio de aquisição eletrônica e, confecção de um dispositivo para visualização de modos normais das ondas com bolinhas de isopor. Tais experimentos devem contribuir tanto na formação e interpretação dos conceitos físicos e problemas envolvidos, como na configuração aberta ou fechada do tubo e vedação do sistema. A aquisição eletrônica é feita por meio de um tubo de vidro com um êmbolo e microfone de eletreto coaxial a este. O movimento é controlado por um motor de passo conectado a um Arduino. O sinal é capturado por computador onde é realizada a extração do envelope da onda. O dispositivo para visualização da onda estacionária consiste de um tubo de acrílico, bolinhas de isopor, alto-falantes e um amplificador de sinal. O sinal capturado pelo sistema eletrônico permitiu verificar a importância da vedação no caso do tubo fechado. Poucos milímetros de afastamento do alto-falante da extremidade do tubo já é o suficiente para que o experimento seja considerado como uma extremidade aberta. Foi possível verificar também a concordância com as equações que relacionam a ordem do modo normal, frequência e comprimento do tubo. (2) A visualização dos modos normais por meio das bolinhas de isopor foi observada com o tubo fechado e com uma extremidade aberta. Concluiu-se que a aquisição eletrônica é uma excelente alternativa aos dispositivos comumente utilizados, como osciloscópios e multímetros, obtendo sucesso no esclarecimento de problemas práticos, como a vedação do tubo.(3) A montagem do tubo de bolinhas foi muito útil nas demonstrações para fins didáticos e poderá ser explorado em trabalhos futuros.

**Palavras-chave:** Modos normais. Ondas sonoras. Onda estacionária.

### Referências:

1 VIEIRA, L. P.; AMARA, D. F.; LARA, V. O. M. Ondas sonoras estacionárias em um tubo: análise de problemas e sugestões. **Revista Brasileira de Ensino Física**, v. 36, n. 1, p. 1-5, 2014.

2 NICHOLS, J. **Theoretical and experimental comparison of pressure in a standing wave tube with attenuation**. Disponível em: <[https://courses.physics.illinois.edu/phys406/NSF\\_REU\\_Reports/2011\\_reu/John\\_Nichols/John\\_Nichols\\_Senior\\_Thesis.pdf](https://courses.physics.illinois.edu/phys406/NSF_REU_Reports/2011_reu/John_Nichols/John_Nichols_Senior_Thesis.pdf)>. Acesso em: 15 ago. 2016.

3 SAAB, S. C. et al. Laboratório caseiro: tubo de ensaio adaptado como tubo de Kundt para medir a velocidade do som no ar. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 22, n. 1, p. 112-120, 2005.



## PG1

### Co-occurrence networks for text authorship identification

AKIMUSHKIN, C.<sup>1</sup>; AMANCIO, D.<sup>2</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>

camilo.akimushkin@gmail.com

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

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Automatic authorship identification is used for copyright resolution, identification of terrorist messages and plagiarism. Traditional methods for authorship identification rely on the counting of features therefore ignoring the structure of texts. (1) A new approach based on complex networks have proven useful for authorship identification tasks. (2) However, many features of texts are also lost when applying this new approach and the full description of a text in terms of networks has not been yet fully exploited. This work explores the word co-occurrence network (3) as a general representation of written texts and introduces features hitherto ignored. Firstly, the dynamics of networks is considered through series analysis. Secondly, the structure and semantics of texts are linked considering the organization of individual words in the networks. Both approaches were successful for the authorship identification task reaching a 85% success score. For the first approach it was also found that network measures series were stationary up to  $p\text{-value} > 0.05$ . The success of the methodology introduced shows an evident influence of the author in the properties of co-occurrence networks and therefore on the way the language was used to create a particular text. The roadmap for future research consists on continuing quantifying other aspects of texts considered subjective and investigating the properties of the novel network features.

**Keywords:** Complex networks. Authorship identification. Text analysis.

#### Referências:

1 ARGAMON, S.; JUOLA, P. Overview of the international authorship identification competition at PAN-2011. In: CONFERENCE ON MULTILINGUAL AND MULTIMODAL INFORMATION ACCESS EVALUATION, 2011, Amsterdam, Netherlands. **Proceedings...** Weimar, Germany: Bauhaus Universitat, 2011.

2 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.

3 CANCHO, R. F.; SOLÉ, R. V. The small world of human language. **Proceedings of the Royal Society of London B**, v. 268, n. 1482, p. 2261-2265, 2001.



## PG2

# A hierarchical model of the metabolic machinery based on the kcore decomposition of plant metabolic networks.

ALMEIDA FILHO, H. A.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

beto@ursa.ifsc.usp.br

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

The modeling of basic structure from metabolic machine and organizational hierarchy of its constituent molecules is a challenge of modern biology. (1) The construction of these models in terms of complex networks has retrieve relevant information of the topology of these metabolic networks. (2) Here we observed that metabolic networks from 17 plants constructed based on the metabolic reaction direction, when coupled with the network percolation through kcores topology revealed information about hierarchy of organization from metabolites at its distribution along the layers. This distribution initially showed that metabolites concentrated in the internal network (central or maximum kcore) are formed only by molecules of the primary basal metabolism, namely ADP, ammonia, AMP, ATP, CO<sub>2</sub>, coenzyme A, diphosphate, H<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O, L-glutamate, NAD<sup>+</sup>, NADH, NADPH and phosphate. Moreover, each one of the complete set of the metabolic reactions from 17 plants, contain at least one of the metabolites from the most central layer of the metabolic networks. In addition we observed that common metabolites to all plants are concentrated in the innermost layers of the network and that the specific metabolites of each plant are concentrated in the outermost layers of the network. Moreover we found that metabolites recognized as participants in the secondary metabolism of plants are concentrated in the outer layers of the network, disappearing four levels before the central core of the networks. These results led to propose a general model for the metabolism of living beings in which there is a processing core of all reactions and inside this core are contained the most basal metabolites; from this core any chemical reaction can be built.

**Palavras-chave:** Core. Metabolic network. Plant.

### Referências:

- 1 HARTWELLI, L. H. et al. From molecular to modular cell biology. **Nature**, v. 402, p. C47-C52, 1999.
- 2 JEONG, H. et al. The large-scale organization of metabolic networks. **Nature**, v. 407, p. 651-654, 2000. doi: 10.1038/35036627.





## PG3

# Gorilla Glass under femtosecond laser pulses: micromachining, waveguide fabrication and nonlinear properties

ALMEIDA, G. F. B.<sup>1</sup>; ALMEIDA, J. M. P.<sup>1</sup>; MARTINS, R. J.<sup>1</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

gustavo.forestalmeida@usp.br

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

Gorilla Glass is a famous type of glass made by Corning and it is of our interest because of its huge positive popularity, commercial and technological impact. But most importantly, it has shown to be an excellent matrix to host femtosecond waveguide microfabrication. (1) In this work, we applied 120-fs laser pulses with wavelength ranging from 460 nm up to 1500 nm at a repetition rate of 1 kHz to study the nonlinear properties of Gorilla Glass and its micromachining process. Z-scan measurements revealed that Gorilla Glass have an approximately constant nonlinear refractive index and no nonlinear absorption in the investigated spectral region. Besides, induced nonlinear effects were found to be shorter than the pulse duration via Optical Kerr-Gate experiments at 520, 650 and 900 nm. Grooves micromachined at different scanning speeds with varying pulse energies revealed the same general features for all wavelengths used with energy threshold around 500 nJ. Such wavelength independence was attributed to the photo-ionization be governed by tunneling rather than multiphoton absorption. Waveguides were microfabricated by placing the microscope objective focus 0.1 mm beneath the sample surface and scanning it over 15 mm of material at 0.2 mm/s, with pulses energy ranging from 250 nJ up to 5000 nJ. Their transversal and longitudinal profiles were analyzed by optical microscopy and its guiding properties were characterized at 632.8 nm and 780 nm in an objective lens based coupling system. The waveguides fabricated at higher pulse energies display modes around the center of the waveguide, while for those fabricated at lower pulse energies light is guided closer to the center. To take advantage of the sample's nonlinearities we couple femtosecond laser pulses, centered at 775 nm, into the inscribed waveguides. With the aid of a spectrometer, we observed that the guided light presented a spectral broadening, which was assigned to self-phase modulation. Furthermore, at higher input pulse energies we have been able to generate and guide white light within the waveguides. The guided white light starts at 450 nm and covers all visible spectrum, while preserving its intensity mode profile. In summary, our study shows that Gorilla Glass fs-laser micromachining can be performed independently of the wavelength and describes the conditions to fabricate waveguides, as well as its optical nonlinearities.

**Keywords:** Femtosecond laser. Optical nonlinearities. Inscribed waveguides.

### Referências:

1 LAPOINTE, J. et al. Making smart phones smarter with photonics. **Optics Express**, v. 22, n. 13, p. 15473, 2014. doi: 10.1364/OE.22.015473.



## PG4

# Structural and functional studies of cellulosomal thermophilic glycoside hydrolases involved on lignocellulosic biomass hydrolysis

ALMEIDA, L. R.<sup>1</sup>; MUNIZ, J. R. C.<sup>1</sup>; SILVA, W. J. G.<sup>2</sup>

al\_leo@usp.br

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

<sup>2</sup>Universidade Federal do ABC

The drop of petroleum reserves, the growing energy demand from emerging countries, and the eminent necessity for reducing carbon dioxide emissions indicate the importance for the pursuit of new sources of renewable energy. (1) However, such sources must have a real character of effective replacement and not only be complementary to the existing resources. (1) Thus, the bioethanol production by hydrolysis of lignocellulosic biomass, such as sugarcane bagasse, has received considerable attention. Due to its potential for development and cost reduction, the enzymatic cellulose hydrolysis can be the key factor for second generation bioethanol production at competitive cost in long term. (2) Thermophilical bacteria, such as *Clostridium thermocellum*, produces an extracellular multi-enzyme complex named cellulosome, which has been demonstrating a very high ability for an efficient degradation of cellulosic biomass, in particular the crystalline portion of cellulose. (3) The main objective of this research project is to characterize the cellulosomal  $\beta$ -glucosidases enzymes from *C. thermocellum* of different glycoside hydrolases (GHs) families, applying structural and biophysical analyses. Considering that purpose, we shall conduct comparative studies, specifically from GH1 and GH3 glycoside hydrolases families. Therefore, it is intended to understand the enzymatic mechanisms of cellulosomal  $\beta$ -glucosidase, which can form the basis for obtaining enzymes with improved performance on biomass depolymerisation.

**Keywords:** Glycoside hydrolases. Cellulosome. *Clostridium thermocellum*.

### Referências:

1 SERRANO-RUIZ, J. C.. **Advanced biofuels:** using catalytic routes for the conversion of biomass platform molecules. Boca Raton: CRC Press, 2015. 330 p.

2 LIU, J. et al . Systems integration for global sustainability. **Science**, v. 347, n. 6225, p. 963, 2015. doi: 10.1126/science.1258832.

3 XU, Q et al. Dramatic performance of *Clostridium thermocellum* explained by its wide range of cellulase modalities. **Science Advances**, v. 2, n. 2, p. 12, 2016. doi: 10.1126/sciadv.1501254.



## PG5

# Ambientes radioativos naturais como fontes de desequilíbrio químico local e suas potenciais implicações prebióticas

ALTAIR, T.<sup>1</sup>; GALANTE, D.<sup>2</sup>

thiago.ferreira@lnls.br

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

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Reatores nucleares naturais foram descritos como arranjos geológicos que continham material físsil natural e água no interior de ambiente rochoso, resultando em radiações em cadeia controladas, que se mantiveram ativas por milhares ou milhões de anos. (1) Esses ambientes podem ter tido um papel relevante no processo de emergência de vida e evolução no contexto de ecossistemas pré-Cambrianos, por proverem energia e os desequilíbrios químicos necessários. Hoje já sabemos que, em ambientes de profundidade com fontes radiolíticas existem espécies microbianas litoautotróficas cuja sobrevivência é independente de fotossíntese a partir de luz solar. (2) A proposta, neste trabalho, é de avaliar, de forma analítica e numérica, condições físico-químicas e as fontes de energia radiolíticas e seus efeitos na habitabilidade destes ambientes no contexto da Terra primitiva, quantificando a parcela da energia biologicamente aproveitável e considerando diferentes fontes de desequilíbrio químico e físico. Tal avaliação é proposta de ser feita tendo como referência a similaridade entre o microambiente alcalino destes ambientes radiolíticos e o de fontes hidrotermais alcalinas, ambientes os quais o potencial prebiótico já se demonstra promissor. (3) A partir deste estudo podemos analisar não somente o potencial prebiótico destes ambientes radiativos naturais na Terra primitiva, mas também se pode avaliar, posteriormente, a habitabilidade de análogos em ambientes extraterrestres, como as luas geladas de Júpiter (Europa, Calisto e Ganimedes) principais alvos das próximas grandes missões de busca por vida no Sistema Solar.

**Palavras-chave:** Origem da vida. Desequilíbrio termodinâmico. Ambientes oligotróficos.

### Referências:

- 1 DRAGANIC, I.G.; DRAGANIC, Z.D.; ALTIPARMAKOV, D. Natural nuclear reactors and ionizing radiation in the precambrian. **Precambrian Research**, v. 20, n. 2-4, p. 283-298, 1983. doi: 10.1016/0301-9268(83)90077-3.
- 2 CHIVIAN, D. et al. Environmental genomics reveals a single-species ecosystem deep within earth. **Science**, v. 322, n. 5899, p. 275-278, 2008. doi: 10.1126/science.1155495 .
- 3 SOJO, V. et al. The origin of life in alkaline hydrothermal vents. **Astrobiology**, v. 16, n. 2, p. 181-197, 2016. doi: 10.1089/ast.2015.1406.



## PG6

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

AMARANTE, A. M.<sup>1</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>; FREITAS, L. C. G.<sup>2</sup>; FRANCA, E. F.<sup>3</sup>; OLIVEIRA, G. S.<sup>4</sup>; IERICH, J. C. M.<sup>5</sup>; MORAES, A. S.<sup>5</sup>; LEITE, F. L.<sup>4</sup>

amarante\_adriano2@hotmail.com

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

<sup>2</sup>Universidade Federal de São Carlos - UFSCar - São Carlos - SP

<sup>3</sup>Universidade Federal de Uberlândia - UFU

<sup>4</sup>Universidade Federal de São Carlos - UFSCar - Sorocaba - SP

<sup>5</sup>Instituto de Medicina Tropical - USP

Neste trabalho foram utilizadas técnicas de modelagem molecular computacional (MMC) para descrever nanossuperfícies funcionalizadas com biomoléculas do sistema imunológico correlacionando resultados experimentais obtidos com o microscópio de força atômica (AFM, do inglês *atomic force microscope*), simulações de dinâmica molecular (DM) e dinâmica molecular direcionada (SMD, do inglês *Steered Molecular Dynamics*). (1) O objetivo principal proposto é avaliar as forças intermoleculares provenientes das interações antígeno-anticorpo (funcionalizados em nanossuperfícies) relacionadas à Neuromielite Óptica (NMO). A NMO é uma doença inflamatória autoimune na qual o próprio sistema imunológico reage contra os nervos ópticos e a medula espinhal, causando lesão desmielinizante. Dados da literatura apontam para o anticorpo anti-aquaporina 4 (anti-AQP4) como um provável biomarcador da doença. (2) Neste contexto, um imunonanossensor vem sendo desenvolvido com a técnica de AFM, o qual visa detectar o anticorpo anti-AQP4 no soro de portadores da doença. Este desenvolvimento está sendo acompanhado pela aplicação de técnicas computacionais capazes de descrever em escala atômica os eventos moleculares que regem o funcionamento deste imunonanossensor.(3) No entanto, tal estudo necessita da utilização de um protocolo inovador para a previsão da estrutura do anti-AQP4 a partir da estrutura do antígeno (aquaporina 4, AQP4), o qual embasará a geração de um modelo computacional capaz de representar detalhadamente os fenômenos experimentais. Os novos modelos e protocolos propostos poderão ser efetivamente corroborados com resultados experimentais de AFM, obtidos em outros projetos desenvolvidos pelo grupo de pesquisas. Por fim, os dados gerados pelo presente estudo auxiliarão de forma crucial no desenvolvimento de imunonanossensores de AFM para identificação de doenças desmielinizantes, bem como a compreensão mais apurada sobre o mecanismo de ação da NMO.

**Palavras-chave:** Modelagem molecular computacional. Imunonanossensor. Anti-aquaporina 4.

**Referências:**



- 1 LEITE, F. L. et al. Nanoneurobiophysics: new challenges for diagnosis and therapy of neurologic disorders. **Nanomedicine**, v. 10, n. 23, p. 3417-3419, 2015. doi: 10.2217/nnm.15.164.
- 2 WINGERCHUK, D. M. et al. The spectrum of neuromyelitis optica. **The Lancet Neurology**, v. 6, n. 9, p. 805-815, 2007. doi: 10.1016/S1474-4422(07)70216-8.
- 3 AMARANTE, A. M. et al. 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.



## PG7

# Study of performance of bulk heterojunction solar cells by using numerical and analytical modeling

AMORIM, D. R. B.<sup>1</sup>; FARIA, R. M.<sup>1</sup>

danirba@usp.br

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

Organic solar cells have been attracted many resources groups because such cells have a capacity of be made under a low cost manufacturing e and build in large amount. But such solar cells are sensitive when they are in exposed to the air because they lose their performance and stability. In this sense, the understanding of the interaction of oxygen with the devices, can be of great interest to push this technology towards the market. To study exactly how they organic solar cells are damaged in the air atmosphere exposition, photovoltaic devices based on nanostructured biphasic thin films of rr-P3HT/PCBM used to be the active layer of the solar cell are made in our laboratory. Our solar cells structure is a bulk heterojunction device with an ITO/PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/Ca-Al diode. This kind of photovoltaic devices are chosen mainly because they are among the most studied systems for organic solar cells. In this study, we carried out a series of experiments addressed to examine the action of oxygen molecules in the performance of an organic solar cell, and also on the parameters that define their electrical properties such as lifetime of photogenerated carriers and their charge carrier mobility. (1) After that, we use a numerical and analytical model to adjust the current-voltage characteristic solar cell to highlight the results.

**Keywords:** Fotovoltaic. Organic. Performance.

### Referências:

1 COUTINHO, D. J.; BALOGH, D. T.; FARIA, R. M. Influence of charge carriers mobility and lifetime on the performance of bulk heterojunction organic solar cells. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, v. 143, p. 503-509, 2015. doi: 10.1016/j.solmat.2015.07.047.



## PG8

# Desenvolvimento de redes proteicas bidimensionais automontáveis

ANDRADE, G. B.<sup>1</sup>; SERRÃO, V. H. B.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

gabrielbelem@ifsc.usp.br

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

A construção de materiais e sistemas funcionais que operem na escala de nanômetros é um alvo da nanotecnologia que propõe a ser útil em diversas áreas correlatas, como cristalização, construção de nanosistemas e microeletrônica. (1) Nesse contexto, o desenvolvimento de sistemas de automontagem compreende uma estratégia bottom-up, a qual permite a construção de sistemas tridimensionais com versatilidade de tamanho, forma e função. Proteínas são bons candidatos a blocos de construção para essa abordagem, devido a sua grande diversidade de características químicas e funções inerentes. Por esse motivo, tem sido crescente a tentativa de usar proteínas para a montagem de arranjos bem ordenados. Estratégias anteriores mostraram limitações ao depender profundamente de interações desenhadas computacionalmente ou mesmo fusões das proteínas utilizadas. (2) Em nosso planejamento, buscamos incorporar diretrizes que se mostraram importantes nos trabalhos presentes na literatura. A utilização de proteínas com simetria rotacional se mostra o caminho mais simples para conseguir redes bem ordenadas. A ligação entre os componentes da rede deve ser forte, porém reversível, para conferir auto-regeneração ao sistema. Além disso, o linker entre os componentes precisa ser curto, mas suficientemente flexível para garantir cristalinidade e permitir o crescimento da estrutura. (3) Nosso projeto para construção de redes proteicas automontáveis utiliza elementos com simetria interna conhecida (proteínas oligoméricas de simetria C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub> e C<sub>6</sub>) fusionados a proteínas que possuem uma alta afinidade com um parceiro de interação específico, os componentes estruturais do celulosomo, Dockerinas e Cohesinas. As proteínas de simetria C<sub>2</sub> são fusionadas a cohesinas, para formar o elemento linear de ligação entre os vértices da rede, os quais são formados pelas proteínas de maior simetria (C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub> ou C<sub>6</sub>) fusionadas a Dockerinas. Nos propusemos a testar três linkers de tamanhos e flexibilidades diferentes para a formação das redes. No primeiro momento, buscamos a montagem de redes bidimensionais, para posteriormente buscar uma estrutura tridimensional. A primeira rede testada foi montada a partir de uma proteína trimérica (PDB: 3C19) fusionada à dockerina tipo 2 de *Bacteroides cellulosolvens* e uma proteína dimérica (PDB: 3BUT) fusionada à coesina correspondente, ambas mediadas por um linker rígido e curto. Imagens de microscopia eletrônica de transmissão obtidas a partir da técnica de Negative Staining mostraram que nas condições testadas, a mistura das fusões forma tanto filmes quanto nanotubos, sendo possível favorecer a formação um tipo em relação ao outro. Estamos investigando os fatores que mediam a formação das diferentes estruturas, bem como fatores que possam controlar o número de camadas em cada estrutura e ainda, o possível controle de sua formação através de um estímulo químico externo, característica desejável nesse tipo de material. A montagem de outras redes com componentes de diferentes simetrias e linkers também está em andamento.

**Palavras-chave:** Nanotecnologia. Automontagem. Simetria.



### Referências:

- 1 WHITESIDES, G. M.; GRZYBOWSKI, B. Self-assembly at all scales. **Science**, v. 295, n. 5564, p. 2418-2421, 2002. doi: 10.1126/science.1070821.
- 2 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.
- 3 SUZUKI, Y.; CARDONE, G.; RESTREPO, D. Self-assembly of coherently dynamic, auxetic, two-dimensional protein crystals . **Nature**, v. 533, n. 7603, p. 1-17, 2016. doi: 10.1038/nature17633.





## PG9

# Topological study of porous media through $\mu$ CT imaging and complex networks

ANDREETA, M. B.<sup>1</sup>; POLLI, S.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, E. L.<sup>1</sup>; RODRIGUES, F. A.<sup>2</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

mariane.andreeta@ursa.ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemática e Computação - USP

The interconnecting system of porous materials is a high complexity system. The development of methods that allow to better understand and quantify its morphological properties is of vital importance to the extraction of fluid contained by the structure. We now are able to use image processing algorithms to this end, by applying microCT imaging to this media, which provides information of the pore network structure. There are already developed methods that allow to quantify the pore-throat interconnection network and assess properties such as pore size distribution and throat size distributions. (1-2) We have applied a network view to this media, by segmenting it into regions, forming a large network in which the pores and the throats are identified. This technique allows a new form of visualization of the porous structure and the possibility of applying network theory to analyze its topology. In this work, we propose the extraction of the pore network to characterize the morphology of the system by measurements of node degree distribution, centralities and information transmission. We show that this information provides a powerful tool to analyze the topology of the media. This project used the microCT images of rock samples which have undergone acidification treatment. This is a well stimulation technique used on the extraction of oil that creates a pathway on the rock, called wormhole. All microCT images and samples of this work were provided by Petrobrás, through collaboration with Carlos Speglich and Rodrigo Surmas. In order to identify the wormhole, a percolation algorithm was applied that eliminated all other information from the measurements. Then, based on the Max Ball Algorithm (3), a new algorithm of pore-throat segmentation was developed that extracts a the network of different regions instead of defining pores and throats. Even though the information of the constrictions (throats) is kept, this network maintains the original morphology of the pore structure. The closeness centralities values demonstrated that the resulting network of the wormhole formations kept the small world characteristic found in many other pore-network models. Furthermore, the scale-free degree distribution is present in the networks of the formations before acidification. These results show that the use of this network model for the characterization of the medium morphology, even though specific for a scale of porosity, is able to provide important insights of the media structure. On the special case of the wormhole morphology, it was essential the use of the region segmentation instead of the pore-throat network for its characterization. This method can be used as a complementary technique on the choice of the acidification procedure that can provide the best results in carbonates. For further work, the network extracted will be used to simulate NMR 1D and 2D experiments in order to find the correlations of the morphology of the network NMR relaxation times distributions.

**Keywords:** NMR. Porous media. Complex networks.



## Referências:

- 1 AL RAOUSH, R. I. ; WILLSON, C. S. . Extraction of physically realistic pore network properties from three-dimensional synchrotron X-ray microtomography images of unconsolidated porous media systems. **Journal of Hidrology.** , v. 300, n. 1-4, p. 44, 2005.
- 2 TALABI, O. et al.. Pore-scale simulation of NMR response. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 67, n. 3-4, p. 168, 2009.
- 3 SILIN, D. B.; JIN, G.; PATZEK, T. W. . Robust determination of the pore space morphology in sedimentary rocks. In: ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE AND EXHIBITION, 2003, Denver, Colorado. **Proceedings...** Denver,Colorado: SPE, 2003, SPE84296.



## PG10

# Holographic p- and d-wave superconductors with backreaction and away from the large N limit

APRILE, N. P.<sup>1</sup>; HARTMANN, B.<sup>1</sup>

nathaprile@yahoo.com.br

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

In this project we are interested in the discussion of holographic models of high temperature superconductors with electron pairing wave function of p- and d-wave type. (1) In particular, we will be interested in the construction of gravity duals away from the probe limit as well as away from the large N limit. On the gravity side, we will hence study systems of coupled differential equations which include the dynamical equations for the space-time, which in the large N limit correspond to the Einstein equations. Away from the large N limit, higher order curvature corrections will be included (such as the Gauss-Bonnet interactions). The aim is to construct phase diagrams for conductor/superconductor as well as insulator/superconductor phase transitions and understand the influence of the backreaction as well as  $1/N$  corrections. Next to the holographic application, the construction will also be able to shed further light on non-linear phenomena in curved space-time and in particular on the existence of black hole solutions with hair, i.e. non-trivial matter fields outside their horizon.

**Keywords:** Gauge-gravity duality. Holographic superconductors. General relativity.

### Referências:

1 RONG-GEN, C. et al. Introduction to holographic superconductor models. **Science China Physics, Mechanics and Astronomy**, v. 58, n. 6, p. 060401-1-060401-46, 2015. doi: 10.1007/s11433-015-5676-5.



## PG11

# Estudos das relações entre estrutura e função de hidrolases de glicosídeos com múltiplos domínios: em busca de enzimas mais eficientes na despolimerização de biomassa lignocelulósica

ARAÚJO, E. A.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

evandroares@usp.br

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

Os recentes avanços da informação genômica sobre microrganismos capazes de hidrolisar a biomassa disponibilizaram informações sobre diversas famílias de hidrolases de glicosídeos (GHs) (1) que, porquanto, não são acompanhadas pela disponibilidade de informação estrutural. Ao lado disso, questões como eficiência enzimática, especificidade por substrato e sensibilidade a inibidores, ainda são pouco compreendidos. Além do mais, a busca por novas enzimas lignocelulósicas é, de fato, um dos grandes desafios na rota tecnológica para a produção de etanol de segunda geração. Uma proposta que pode permitir a redução dos custos de produção do etanol celulósico é desenvolver enzimas artificiais programadas para degradar especificamente cada polissacarídeo. O foco deste trabalho é entender os efeitos da modularidade das GHs na desconstrução da biomassa vegetal fazendo uma análise comparativa entre proteínas mono e multi domínios catalíticos afim de produzir enzimas artificiais. Pretendem analisar a importância dos domínios, bem como dos "linkers", além do próprio estudo funcional sob diversos substratos e a obtenção de novas estruturas por cristalografia de raios-X. Para isso, vamos usar um "set" de técnicas físicas experimentais e computacionais tais como cristalografia, SAXS, dinâmica molecular e microscopia eletrônica, aliadas a técnicas de bioquímica. *Bacillus licheniformis* é uma bactéria Gram-positivo que produz variadas classes de Hidrolases de glicosídeos, dentre as quais GH9 (BIGH9) e GH48 (BIGH48). Essas enzimas foram clonadas, expressas e purificadas. Apresentam atividade sobre CMC, PASC, avicel, sigmacell, papel filtro e celulose bacteriana, entretanto, exibem maior atividade sobre PASC e celulose bacteriana. Os valores de pHs ótimos observados foram 5,5 para BIGH48 e 7,0 para BIGH9 com temperatura de maior atividade observada tanto para BIGH48 quanto para BIGH9 de 60 °C. São enzimas processivas que apresentam alto grau de sinergismo sobre celulose bacteriana e PASC. Três modelos cristalográficos foram obtidos para BIGH9. Um apo, um com celobiose e um com celotriose, os quais foram difratados a 2,0 Å no grupo espacial C2 com parâmetros de unidade cela  $a=133,19$  Å,  $b=66,75$  Å e  $c=112,40$  Å e 2,2 Å, respectivamente, para BIGH9-apo e BIGH9 com celobiose e celotriose. Os modelos estruturais em alta resolução compreendem um domínio catalítico e um módulo acessório de ligação à celulose da família 3c. As análises de flexibilidade por SAXS permitiram observar que a temperatura influencia o aumento da flexibilidade enzimática, inicialmente induzindo pequenas movimentações interdomínios de modo que com o aumento da temperatura essas mudanças vão se tornando mais globais. Essa flexibilidade então promove o aumento da coletividade entre os domínios acessório e catalítico aproximando-os para que seja formado um bolsão catalítico que acomode a fibra de celulose, bem como o aumento da atividade enzimática.

**Palavras-chave:** Enzimas e bioetanol. Modularidade cooperativa. Cristalografia e SAXS.



**Referências:**

- 1 HENRISSAT, B. A classification of glycosyl hydrolases based on amino-acid sequence similarities. **Biochemical Journal**, v. 280, n. 2, p. 309-316, 1991. doi: 10.1042/bj2800309.



## PG12

# Fabricação, caracterização e estudo de degradação por oxigênio de células solares orgânicas

ARAÚJO, F. L.<sup>1</sup>; FARIA, R. M.<sup>1</sup>

franaraujo@usp.br

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

Os dispositivos fotovoltaicos orgânicos são uma alternativa promissora para a geração de energia elétrica limpa e renovável, principalmente devido ao seu potencial de baixo custo, facilidade na fabricação e maior flexibilidade mecânica. Os fatores limitantes dessa tecnologia são o tempo de vida útil, ainda insuficiente, e a limitada eficiência de conversão. Nos últimos anos, houve um progresso nos valores de eficiência destes dispositivos atingindo valores próximos de 11%. (1) Dentre os fenômenos físicos que governam a eficiência de conversão de energia em dispositivos do tipo heterojunção de volume estão os processos de absorção de luz e geração de éxcitons, difusão de éxcitons e separação de cargas, transporte e coleta de cargas. Uma melhor compreensão destes fenômenos é de extrema importância para melhorar o desempenho destes dispositivos. O objetivo geral deste trabalho foi o estudo de dispositivos fotovoltaicos orgânicos com a estrutura ITO/PEDOT:PSS/PBDTT-FTTE:PC71BM/Ca/Al em diferentes condições de funcionamento. Em específico, realizamos medidas de espectroscopia de UV-Vis, medidas de J-V no escuro e sob iluminação, transiente Foto-CELIV, extração de cargas (CE), fotocorrente transiente (TPC) e fotovoltagem transiente (TPV). Estas medidas foram realizadas em diferentes temperaturas e condições de iluminação em atmosfera inerte de nitrogênio, bem como o estudo da exposição dos dispositivos em atmosfera ambiente. Este conjunto de técnicas experimentais nos permitiu calcular parâmetros necessários para a otimização dos dispositivos fotovoltaicos, tendo o melhor dispositivo com eficiência superior a 7%. Além dos parâmetros macroscópicos estudamos os parâmetros microscópicos tais como a mobilidade de carga que é alterada com a variação da temperatura como também o tempo de vida das cargas fotogeradas para diferentes intensidades do sol, obtendo valores menores do que 10  $\mu$ s. Já as medidas em atmosfera ambiente mostraram que o dispositivo sofreu uma redução na corrente de curto-circuito e no fator de preenchimento de acordo com o tempo de exposição neste ambiente ocasionando perdas significativas em sua eficiência de conversão. Etapas futuras deste trabalho incluem a utilização de modelagem teórica e a investigação de degradação por oxigênio tanto no polímero quanto no fulereno.

**Palavras-chave:** Dispositivos fotovoltaicos orgânicos. PBDTT-FTTE:PC71BM. Eficiência de conversão.

### Referências:

1 GREEN, M. A. et al. Solar cell efficiency tables (version 48). **Progress in Photovoltaics**, v. 24, n. 7, p. 905-913, 2016. doi: 10.1002/pip.2788.



## PG13

# Developments in evolutionary games of indirect reciprocity

ARAUJO, G. D.<sup>1</sup>; MAIA, L. P.<sup>1</sup>

guilherme.david.araujo@usp.br

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

Biological evolution addresses fitness, reproductive success, in the context of the replicator benefit, favouring the evolution of those traits that enhances survival and reproduction of genes. Cooperation, or the interest in producing the benefit of other individuals, is a behaviour requiring specific conditions or further explanations, because it otherwise would oppose the course of evolution. Among the various kinds of cooperation observed in nature, one of particular interest in the study of populations is the behaviour of reciprocity, where the intention of helping someone is based on the prospect of being helped in return. For the existence of this scenario, beyond the required evolutionary capacity, a complex condition is necessary. One that maintains its stability and prevents the population from breaking the chain of cooperation by the emergence of defection traits, intentions of exploring the existence of cooperative behaviour. Yet we see in nature many examples of this kind of cooperation in the form of direct reciprocity, when the help is returned from the individual that was helped. An even more challenging situation, only seen in human populations, is that of indirect reciprocity (1), that happens in the case of helping someone with the expectation of getting the help from a third party, through some system of reputation. The multiplying benefits of this condition are clear, and its vitality for the maintenance of large populations and the creation of our complex moral systems. But how can such a condition be stable? The study of direct reciprocity was successfully developed in models of evolutionary game theory (2), a powerful tool for treating systems of evolving populations. More recently, the case of indirect reciprocity is also being modelled in the same way. In evolutionary game theory, we can treat behaviours as strategies of interacting players where reproductive fitness is quantified in the form of a payoff function. In the models of indirect reciprocity, reputation is based in the result of a game that individuals must play and choose whether to cooperate or defect. In 2015, Nowak and Ghang (3) introduced a model of optional interactions, considering a reputation-based choice of entering a game. The authors develop calculations in finite populations and take the main analytical results in the limit of infinite populations. We considered this model and obtained finer results calculating in infinite populations. We also studied the stability of cooperation in a more general situation with the presence of other strategies. In our present developments, we consider different scenarios that model execution errors, incomplete information for reputation and other traits. Further developments of optional interactions include structured populations, studies of fixation probabilities, simulations and generalizations of parameters like reputation and strategies.

**Keywords:** Evolution of cooperation. Indirect reciprocity. Evolutionary game theory.

### Referências:

1 NOWAK, M. A.; SIGMUND, K. Evolution of indirect reciprocity. **Nature**, v. 437, p. 1291-1298, 2005. doi: 10.1038/nature04131.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 HOFBAUER, J.; SIGMUND, K. **Evolutionary games and population dynamics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 323 p.

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.





## PG14

# Estudo da purificação e caracterização de biossurfactantes produzidos por linhagens bacterianas isoladas a partir de rocha de reservatório de petróleo

ARGENTIN, M. N.<sup>1</sup>; BOSSOLAN, N. R. S.<sup>1</sup>

marcela.argentin@usp.br

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

Surfactantes constituem uma classe importante de produtos químicos industriais amplamente utilizados em quase todos os setores da indústria moderna. Sua natureza anfipática faz com que esses compostos sejam capazes de reduzir a tensão superficial e interfacial nas interfaces entre líquidos, sólidos e gases, facilitando a homogeneização entre fases com diferentes graus de polaridade. (1) Os surfactantes produzidos por microrganismos são chamados de biossurfactantes e são formados essencialmente por polímeros extracelulares excretados pelas células, sendo considerados como subprodutos de seus sistemas metabólicos. São estruturalmente diversos e podem ser reunidos em cinco principais classes de moléculas: glicolipídeos, fosfolipídeos e ácidos graxos, lipopeptídeos e lipoproteínas, surfactantes poliméricos e surfactantes particulados. (2) Os glicolipídeos, biossurfactantes mais estudados, são compostos por uma unidade de carboidrato ligada a uma cauda hidrofóbica constituída por cadeias alifáticas de ácidos graxos. Lipopeptídeos e lipoproteínas possuem, em sua molécula, um domínio hidrofílico formado por um peptídeo associado a um domínio lipídico, possuindo conhecida atividade antimicrobiana. Os fosfolipídeos, lipídios neutros e ácidos graxos e biossurfactantes particulados estão presentes em membranas de microrganismos, ajudando na emulsificação e captura de hidrocarbonetos. Já os tensoativos poliméricos possuem alta viscosidade e alto peso molecular em decorrência de suas grandes cadeias de carboidratos e proteínas, podendo conter porções lipídicas. (3) Os biossurfactantes atraem considerável atenção científica pois possuem alta biodegradabilidade, baixa toxicidade, atividade em extremos de temperatura, pH e salinidade, podendo ser produzidos através da fermentação de resíduos da agroindústria. Essas propriedades diferenciam os biossurfactantes dos tensoativos quimicamente produzidos, tornando-os comercialmente promissores. Suas características singulares sugerem uma vasta aplicação na indústria petrolífera, podendo ser incorporados na composição de óleos lubrificantes, na biorremediação e dispersão em derramamentos de petróleo, remoção de resíduos em tanques de estoque, bem como nos processos de recuperação de petróleo melhorada por microrganismos e/ou seus produtos (MEOR). Nos processos de MEOR, os produtos metabólicos de microrganismos (residentes ou introduzidos) tais como os biossurfactantes auxiliam na redução da tensão na interface óleo/rocha, reduzindo as forças capilares que impedem o óleo de se mover através dos poros da rocha. Neste contexto, este trabalho propõe o estudo da extração, purificação e caracterização química de biossurfactantes produzidos por linhagens previamente isoladas a partir de amostras de rochas coletadas a cerca de 3.000 metros de profundidade de um reservatório *offshore* localizado na região sudeste do Brasil. Os biossurfactantes serão produzidos a partir de cultivos dos isolados em meio líquido, em condições melhoradas de produção. A partir do extrato livre de células, as moléculas tensoativas serão inicialmente recuperadas por precipitação ácida e/ou adsorção em resina, seguida de extração com clorofórmio/metanol. Análises de teor de proteína e lipídeos presentes nas moléculas serão feitas pelos métodos de Bradford e Blich-Dyer, respectivamente. Para a purificação



e caracterização, serão inicialmente empregadas as técnicas de cromatografia em camada delgada em conjunto com reveladores orgânicos para identificação parcial de componentes orgânicos específicos, seguida de espectroscopia de massa (ESI-MS/MS). A partir do trabalho proposto, espera-se obter um extrato purificado de pelo menos um dos biossurfactantes produzidos pelas linhagens isoladas, de modo a permitir sua caracterização química.

**Palavras-chave:** Termófilos. Bioemulsificante. MEOR.

#### **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 CAMEOTRA, S. S.; MAKKAR, R. S. Synthesis of biosurfactants in extreme conditions. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 50, n. 5, p. 520-529, 1998.
- 3 MUKHERJEE, A. K.; DAS, K. Microbial surfactants and their potential applications: an overview. In: SEN, R. (Ed.). **Biosurfactants: advances in experimental medicine**. New York: Springer, 2010. p. 54-64



## PG15

# Development of an immersed interface method for the 2D Navier-Stokes equations

AURICHIO, V. H.<sup>1</sup>; CUCCHIERI, A.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, M. L. B.<sup>2</sup>

vinicius.aurichio@usp.br

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

<sup>2</sup>Instituto 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. The mathematical modelling of such physical systems are challenging because the governing equations of motion for fluids, the Navier-Stokes equations, are non-linear. Besides that, other difficulties arise from the treatment of complex domain geometries. Here, we propose to study and develop computational methods to numerically obtain approximate, yet reliable, solutions for the Navier-Stokes equations in the case of complex geometries. A common method to deal with complex geometries consists in building a mesh (structured or not) around the immersed bodies and imposing boundary conditions on their surfaces. However, structured body-fitted meshing is a difficult problem by itself, and unstructured meshings are inherently difficult to optimize. Additionally, in both cases it is necessary to rebuild the mesh at every time-step, when dealing with moving boundaries. In 1972, seeking an alternative approach to avoid those problems, Peskin (1) proposed a method in which the Cartesian grid describing the fluid was kept fixed, while the immersed bodies were described by a set of connected points. Since then, many variations of that method have appeared, including one by Ghias, Mittal and Dong. (2) Here we present a slightly modified version of Ghias' method and discuss possible improvements, such as including the shock detector developed by Oliveira and Pires. (3)

**Keywords:** Navier-Stokes. Immersed interface. Finite-difference.

### Referências:

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

2 GHIAS, R.; MITTAL, R.; DONG, H. A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows. **Journal of Computational Physics**, v. 255, n. 1, p. 528-553, 2007. doi: 10.1016/j.jcp.2006.12.007.

3 OLIVEIRA, M. L. B.; PIRES, V. A. Analysis of a high-order finite difference detector for discontinuities. **International Journal of Computer Mathematics**. doi: 10.1080/00207160.2015.1124100. In press.



## PG16

# Estudos estruturais e funcionais das proteína TarA envolvida na síntese da parede de ácidos teicóicos em *Staphylococcus aureus*

AZEVEDO, E. C. de<sup>1</sup>; NASCIMENTO, A. S.<sup>1</sup>

erika.chang.azevedo@usp.br

<sup>1</sup>Instituto 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 a realização de experimentos foi escolhida a glicosiltransferase denominada TarA, a qual adiciona uma molécula de N-acetilmanosamina, sintetizando o dissacarídeo inicial na formação da parede de ácidos teicóicos. O DNA utilizado para a clonagem é pertencente à cepa de *S. aureus* SA16 o qual foi gentilmente cedido pela prof. 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* para que fosse realizada a expressão da proteína. Foram realizados testes de solubilidade para a proteína utilizando diferentes detergentes. Após, a proteína foi identificada por espectrometria de massas e purificada por cromatografia de afinidade. Além disso, foram realizados testes de termoestabilidade para determinar qual o melhor tampão a ser utilizado. Foram feitos também testes para condições de cristalização utilizando-se três kits diferentes, nos quais algumas gotas apresentaram precipitados.

**Palavras-chave:** *Staphylococcus aureus*. Parede de ácidos teicóicos. MRSA.

### 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. 6, n. 5, p. 538-548, 2013. doi: 10.1016/j.mib.2013.06.012.

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. 576-585, 2015. doi: 10.1073/pnas.1418084112.

3 DABUL, A. N. G. et al. 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.



## PG17

# Otimização de modularidade baseada em caminhadas auto-excludentes

RONQUI, J. R. F.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>; BAGNATO, G. G.<sup>1</sup>

guilherme.bagnato@usp.br

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

Diferentes tipos de caminhadas aleatórias tem-se mostrado muito úteis no estudo de propriedades estruturais de redes complexas. Entre elas, a caminhada auto-excludente (SAW), que atinge apenas vértices não visitados no mesmo passeio, destaca-se pela eficiente exploração das redes. Portanto, o SAW se tornou uma ferramenta promissora na identificação de estruturas de comunidades. Apesar de sua importância, detecção de comunidades permanece um problema em aberto devido à alta complexidade computacional associada ao problema de otimização além da falta de uma definição formal do significado de comunidade. (1) Neste trabalho, propomos um método de detecção de comunidades baseado no SAW para extrair uma estrutura de comunidades da rede otimizando o parâmetro modularidade. (2) Combinamos características extraídas desta dinâmica com a análise de componentes principais para posteriormente classificar os vértices em grupos por meio da clusterização hierárquica aglomerativa, definindo como métrica a dissimilaridade de Bray-Curtis e como critério de união dos conjuntos o average linkage (UPGMA). Para avaliar a performance deste novo algoritmo, comparamos os resultados com outros três métodos populares de otimização de modularidade: Girvan-Newman, Fastgreedy e Walktrap, aplicados em dois tipos de redes sintéticas (3) e seis redes reais bem conhecidas. Para os benchmarks, esta nova técnica produziu resultados satisfatórios em diferentes combinações de parâmetros como tamanho de rede, distribuição de grau e número de comunidades. Já para as redes reais, obtivemos valores de modularidade superior aos métodos tradicionais, indicando uma distribuição de grupos mais adequada a realidade. Os próximos passos deste trabalho consistem na generalização do algoritmo para redes com peso e direção, assim como determinar comunidades individuais através da exploração local característica do SAW. Outra possibilidade é adaptar o novo método para melhor compreensão do impacto dos metadados na estrutura de comunidades.

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

### Referências:

1 FORTUNATO, S. Community detection in graphs . **Physics Reports**, v. 486, p. 75-174, 2010. doi: 10.1016/j.physrep.2009.11.002.

2 NEWMAN, M. E. J . Modularity and community structure in networks. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 103, n. 23, p. 8577-8582, 2006. doi: 10.1073/pnas.0601602103.

3 LANCICHINETTI, A. et al. Benchmark graphs for testing community detection algorithms. **Physical**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Review E**, v. 78, n. 4, p. 046110, 2008. doi: 10.1103/PhysRevE.78.046110.



## PG18

# Studies of THG at interfaces of different optical materials with ultrashort laser pulses: the influence of self-focusing effect

BARBANO, E. C.<sup>1</sup>; ZILIO, S. C.<sup>1</sup>; MISOGUTI, L.<sup>1</sup>

emerson.barbano@usp.br

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

Third-harmonic generation (THG) is a nonlinear optical process that has been used in a variety of applications such as third-order nonlinear material's characterization, ultrafast pulse measurements and nonlinear microscopy. In the tightly focused laser beam condition THG occurs only at the material's interfaces where the focal symmetry is broken due to the presence of two different media with different refractive index and/or third-order susceptibilities. Measuring slabs of different types of optical glasses using femtosecond laser pulses we could explain the asymmetric THG intensity profile observed at the interfaces.(1) The harmonic generated at the exit interface is systematically stronger than one generated at the entrance and this phenomenon can be understood by taking into account the presence of self-focusing effect. Basically, the self-focusing reduces the beam waist radius at the exit interface, resulting in greater laser irradiance and, consequently, higher THG. This study was then extended to the interfaces of a cuvette filled with organic solvents.(2) Such a system presents four interfaces and a mixture of nonlinear processes contributions since the cuvette walls present only electronic nonlinearity and the solvents present both electronic and orientational. Despite THG originates from the electronic part of the nonlinear susceptibility, self-focusing may have both instantaneous electronic and slow orientational contributions depending on the material. In this way, the cuvette configuration is more complex but permits to obtain additional information of the process. We carried out THG measurements for the two setups, slabs of glasses and cuvettes filled with solvents, and we were able to explain the THG intensity profiles considering the influence of self-focusing. Using our approach was also possible to determine the nonlinear refractive index and third-order electrical susceptibility of each material. Due to the noninstantaneous nature of the orientational process, the self-focusing from the solvent may be influenced by the pulse duration. In this case, the THG, which is an instantaneous electronic phenomenon, can be indirectly affected by pulse duration by means of the self-focusing effect. Then, we have performed THG measurements as a function of the pulse duration of the pump beam. Usually, the slow orientational contribution is not considered for material's characterization by THG which may lead to incorrect nonlinear coefficient values, that means our study is important from the fundamental point of view and also for applications such as material's characterization. In all measurements we have used as light source a chirped-pulsed-amplified laser system Ti:sapphire which generates pulses at 1kHz repetition rate at 775 nm with 150 femtoseconds of pulse duration. In the first stage of the project, fundamental understanding and nonlinear optical parameters determination, we have used an OPA, pumped by the amplified system, in order to generate pulses at 1300 nm, TH at 433 nm, which is a good transparency window for both the optical glasses and solvents used. In the second stage, we have used directly the amplified system at 775 nm, TH at the ultraviolet at 258 nm, in order to control the pulse duration ( $\sim 150$  fs to 2 ps) by the laser compressor.





**Keywords:** Third-harmonic generation. Self-focusing. Femtosecond laser pulses.

**Referências:**

1 BARBANO, E. C.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Influence of self-focusing of ultrashort laser pulses on optical third-harmonic generation at interfaces. **Optics Letters**, v. 38, n. 2, p. 5165-5168, 2013. doi: 10.1364/OL.38.005165.

2 BARBANO, E. C. et al. Third-harmonic generation at the interfaces of a cuvette filled with selected organic solvents. **Applied Optics**, v. 55, n. 3, p. 595-602, 2016. doi: 10.1364/AO.55.000595.



## PG19

# Metrologia quântica com medida de tempo finito

BARRETO, D. L.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

diogolbar@gmail.com

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

A estimação de parâmetros utilizando a teoria clássica de probabilidades possui papel de grande importância na ciência e tecnologia. Tais técnicas de estimação também se mostram relevantes na teoria quântica, mas é necessário que as regras para estimativas clássicas sejam adequadas ao contexto e sistema que desejamos explorar. Esta transição para a teoria quântica já é bem fundamentada na literatura atual principalmente para o caso de sistemas fechados. (1) Porém, isto não é verdade para sistemas abertos, onde ainda há um vasto terreno a ser explorado. Neste trabalho, nós focamos nossa atenção em sistemas quânticos abertos (2), em particular, queremos explorar os limites de precisão das estimativas paramétricas quando o sistema é submetido a medidas de tempo finito. (3) É sabido que a desigualdade de Cramer-Rao nos dá um limite inferior para o erro de uma estimativa. Na teoria quântica de sistemas fechados este limite também se mostra presente, podendo ser saturado ou até superado com escolha apropriada de um método de medida. Porém para sistemas abertos ainda se buscam métodos gerais para saturar e superar o limite de Cramer-Rao. Visando dar nossa contribuição a esta área de pesquisa, decidimos explorar os efeitos de medidas de tempo finito em um sistema quântico, a fim de entender as consequências que tais medidas possam ter na desigualdade de Cramer-Rao.

**Palavras-chave:** Informação quântica. Inferência quântica. Sistemas abertos.

### Referências:

- 1 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Advances in quantum metrology. **Nature Photonics**, v. 5, n. 4, p. 222-229, 2011. doi: 10.1038/nphoton.2011.35.
- 2 ESCHER, B. M.; MATOS FILHO, R. L.; DAVIDOVICH, L. General framework for estimating the ultimate precision limit in noisy quantum-enhanced metrology. **Nature Physics**, v. 7, n. 5, p. 406-411, 2011. doi: 10.1038/nphys1958.
- 3 CRESSER, J. D. et al. Measurement master equation. **Optics Communications**, v. 264, n. 2, p. 352-361, 2006. doi: 10.1016/j.optcom.2006.02.061.



## PG20

# Efeito da adição de dopantes e da rota de síntese nas propriedades do composto $\text{CaTiO}_3$

BARROS, K. L. P. de<sup>1</sup>; MASTELARO, V. R.<sup>1</sup>

klp.barros@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto 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. Verificou-se o efeito do método de síntese utilizado e da adição de íons dopantes como  $\text{Mg}^{2+}$  e  $\text{Ni}^{2+}$  nas propriedades morfológicas e estruturais do composto  $\text{CaTiO}_3$  que foi 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  $\text{CaTiO}_3$ . 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). Na avaliação de fotoatividade realizada (fotodegradação do corante rodamina B) foi observado que os compostos sintetizados pelo método hidrotermal com os precursores oxisulfato de titânio e cloreto de cálcio apresentaram melhor atividade fotocatalítica que os compostos sintetizados pelo método solvotermal (solvente PEG-200). Tais estruturas podem ser consideradas promissoras para uso em aplicações fotocatalíticas.

**Palavras-chave:**  $\text{CaTiO}_3$ . Síntese hidrotermal. Dopantes.

### Referências:

1 YANG, X. et al. Formation mechanism of  $\text{CaTiO}_3$  hollow crystals with different microstructures.. **Journal of the American Chemical Society**, v. 132, n. 40, p. 14279-14287, 2007. doi: 10.1021/ja106461u.

2 ALFREDSSON, M. et al. Dopant control over the crystal morphology of ceramic materials. **Surface Science**, v. 601, n. 21, p. 4793-4800, 2007. doi: 10.1016/j.susc.2007.07.025.



## PG21

# g-factors, effective mass and structural parameters in III-V semiconductors from hybrid-density functional theory

BASTOS, C. M. O.<sup>1</sup>; SABINO, F. P.<sup>1</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>; SIPAHI, G. M.<sup>1</sup>

cmobastos@ursa.ifsc.br

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

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

III-V semiconductors have received great attention since the 50's due to the wide range of technological applications such as light-emitting diodes (LEDs) and recently, the study of new physical phenomena such as topological insulators and Majorana fermions. Thousands of studies have been reported every year, however, most of those studies are focused on derived structures that use these materials as the basis and not on their bulk properties, except for a few particular cases, e. g. the nitrides class (AlN, GaN, and InN), and hence, systematic studies of bulk properties are not common. State-of-the-art hybrid density functional theory (DFT) provides the possibility to describe bulk semiconductor properties, including the correct gap energies description and reasonable computational cost. In this study, we report a theoretical investigation of the structural and electronic properties of 12 III-V zinc blende semiconductors employing hybrid-DFT within the HSE functional. (1) The parameters were adjusted through a fitting of the HSE functional to obtain the closest combination of the energy band gap and spin-orbit splitting values to the experimental ones at the  $\Gamma$  point. Our calculated properties such as equilibrium volume, elastic constants, and bulk modulus are in excellent agreement with experimental results. Moreover, to obtain a deep understand of the electronic properties, we employed the  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Kane model (2) to extract the effective mass parameters and electronic g-factor directly from our DFT-HSE band structures (3) and the results are in agreement with previous results. Therefore, our study contributes to improving our understanding of the structural, and electronic properties of the III-V semiconductors.

**Keywords:** DFT. Semiconductors. k.p method.

### Referências:

1 HEYD, J.; SCUSERIA, G. E.; ERNZERHOF, M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. **The Journal of Chemical Physics**, v. 118, n. 18, p. 8207-8215, 2003. doi: 10.1063/1.1564060.

2 ENDERLEIN, R.; HORING, N. J. M. **Fundamentals of semiconductor physics and devices**. Singapore: World Scientific, 1997. 771 p.

3 BASTOS, C. M. O. et al. **Stability and accuracy control of k.p parameters**. Available from: <<https://arxiv.org/pdf/1608.04982.pdf>>. Accessible at: 25 Aug. 2016.



## PG22

# Abordagem histórico-investigativa em atividades experimentais: limites e obstáculos dentro da sala de aula

BATISTA, R. F. M.<sup>1</sup>; SILVA, C. C.<sup>1</sup>

tata.fis@gmail.com

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

Nas últimas décadas, alternativas metodológicas e curriculares têm sido discutidas por pesquisadores da área de ensino de ciências em substituição ao ensino tradicional, de forma que o professor consiga diversificar sua prática em sala de aula. Entre essas alternativas estão o ensino investigativo e abordagens baseadas em perspectiva histórica, filosófica e sociológica. O ensino investigativo (EI) é caracterizado por atividades problematizadoras, em que os alunos aprendem a investigar, observar, refletir, discutir, planejar e testar hipóteses, colher e analisar dados, de modo a construir explicações para um determinado problema, propiciando assim a construção de conceitos e modelos através da reflexão crítica do aluno. (1) Nessa abordagem o professor atua como um guia, orientando os alunos na resolução do problema e promovendo a sistematização do conhecimento. A história, filosofia e sociologia da ciência (HFSC) pode ser uma aliada do EI ao trazer situações de investigação para a sala de aula baseada em episódios históricos, podendo contribuir para evitar visões distorcidas sobre os processos e fatores envolvidos na construção do conhecimento científico, favorecer a aprendizagem de conceitos e procedimentos típicos da atividade científica e melhorar o processo de ensino-aprendizagem de ciências. (2) Essas duas abordagens, aliadas, culminam na abordagem histórico-investigativa (HI) que consiste, portanto, no uso de atividades experimentais de cunho investigativo e pautadas na HFSC. Neste trabalho discutiremos os limites envolvidos na inserção da abordagem HI na reelaboração de roteiros de kits experimentais da Experimentoteca do Centro de Divulgação Científica e Cultural da Universidade de São Paulo (CDCC-USP). A pesquisa em andamento é do tipo Design Based Research (DBR), baseada na colaboração com professores usuários dos kits experimentais e que participam de forma ativa na reelaboração dos roteiros em parceria com os pesquisadores. Dessa forma, buscamos agregar o conhecimento pedagógico do professor no desenvolvimento e implementação de inovações metodológicas em sala de aula.

**Palavras-chave:** Abordagem histórico-investigativa. Atividades experimentais. Desafios na sala de aula.

### Referências:

1 CARVALHO, A. M. P. O ensino de ciências e a proposição de sequências de ensino investigativas. In: CARVALHO, A. M. P. (Org). **Ensino de ciências por investigação**: condições para implementação na sala de aula. São Paulo: Cengage Learning, 2013. p. 1-20

2 MATTHEWS, M. R. **Science teaching**: the role of history and philosophy of science. New York: Routledge, 1994. 296 p.



## PG23

# A comparative study of two selenophosphate synthetase (SPS2) isoforms in *Naegleria gruberi* focusing on selenium metabolism

BELLINI, N. K.<sup>1</sup>; SILVA, M. T. A.<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

nataliabellini@ursa.ifsc.usp.br

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

The selenium intake into metabolism involves the selenocysteine (Sec) biosynthesis, which is incorporated co-translationally into the proteins whose functions in cell growth and redox balance have been extensively studied. (1) In the genome of a free-living amoeba, *Naegleria gruberi*, all potential genes related to the Sec pathway were identified (2) but some factors remain unknown. Specifically, two atypical gene fusions found in the essential protein selenophosphate synthetase (SPS2) call attention, a methyltransferase (MT) and a NifS like protein (3) both fused at the N terminal domains. SPS2 is involved in the catalytic conversion of selenide and adenosine triphosphate (ATP) into selenophosphate required for the Sec synthesis. To improve the understanding of selenium metabolism and the function of *Ng*SPS2 fused with MT and NifS domains, we are developing sodium selenite supplementation analysis in *N. gruberi* using a fresh culture growing with medium ATCC 1034 compared to cultures supplied with different concentration of sodium selenite. Our results showed a dual behavior for selenium ranging from improvement of growth cell (5  $\mu$ M) to decrease of growth cell (25  $\mu$ M). To verify the involvement of *Ng*SPS2.MT comparing it with *Ng*SPS2.NifS in each treatment, the specific mRNA expression will be quantified by using Real-Time PCR. The 18S gene has been tested as a normalizer and the primer efficiency was standardized. We apply the selenium treatment protein extract in western blotting analysis and, knowing that the full length protein has around 80,4 kDa, we detected an unexpected molecular mass of approximately 50 kDa using *Ng*SPS2.MT antibody. We propose that after the translation, *Ng*SPS2.MT suffers a cleavage that isolates MT from SPS2. Thus, to solve this question we are applying efforts in the immunoprecipitation tests, whose eluted would be identified by mass spectroscopy. In fluorescence microscopy it was detected an *Ng*SPS2.MT cytosolic localization using both *Ng*SPS2.MT-Ctd and *Ng*SPS2.MT antibodies. Similar analysis will be employed with *Ng*SPS2.NifS after the recombinant expression and polyclonal antibody production. Additionally, a healthy culture of *N. gruberi* was conducted to the scanning electron microscope (SEM) and the photomicrographs will be used to detect possible dose-dependent morphological changes after each selenite treatment. In vitro approach using C terminal domain of *Ng*SPS2.MT recombinant protein its been performing to investigate the ATP hydrolysis and nucleotides will be quantify and separate using a SUPELCOSIL LC-18-S column by high-performance liquid chromatography (HPLC). In order to investigate and compare the ATPase activity of two selenophosphate synthetase isoforms these trials will be conducted with NifS domain. All together these data would extend the comprehension of selenocysteine pathway and selenium sensitivity in *N. gruberi*.

**Keywords:** *Naegleria gruberi*. Selenophosphate synthetase. Selenium metabolism.

**Referências:**



- 1 LUKASHENKO, N. P. Expanding genetic code: amino acids 21 and 22, selenocysteine and pyrrolysine. **Russian Journal of Genetics**, v. 46, n. 8, p. 899-916, 2010. doi: 10.1134/S1022795410080016.
- 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. doi: 10.1016/j.molbiopara.2013.04.002.
- 3 MARIOTTI, M. et al. Evolution of selenophosphate synthetases: emergence and relocation of function through independent duplications and recurrent subfunctionalization. **Genome Research**, v. 25, n. 9, p. 1256-1267, 2015. doi: 10.1101/gr.190538.115.



## PG24

# Algoritmo de reconhecimento de padrões em eventos do observatório Pierre Auger

BENATTI, A.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

alexandre.benatti@usp.br

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

Os detectores de superfície do observatório Pierre Auger (1) são tanques repletos de água e completamente escuros com sensores fotomultiplicadores instalados na parte interna. Quando as partículas carregadas atravessam os tanques com velocidade próximas a da luz geram radiação ultravioleta devido ao efeito Cherenkov. (2) Os sensores fotomultiplicadores do tanque medem e convertem essa radiação em sinais elétricos que são enviados para a central de dados, registrando assim um evento. Alguns eventos apresentam comportamento incomum, não reproduzido por simulações. O objetivo deste projeto é selecionar os eventos de interesse e fazer um levantamento estatístico deles a fim de obter um padrão que sugira os possíveis fenômenos físicos envolvido nesse comportamento análogo. Estes sinais se caracterizam por possuir mais de um pico, bastante acima do nível esperado de ruído, coincidindo em pelo menos dois tanques na evolução temporal do sinal registrados. Devido ao grande número de dados registrados pelo Observatório Pierre Auger é preciso desenvolver uma ferramenta computacional que permita reconhecer e selecionar aqueles que apresentam o tipo de estrutura desejadas. Nesse trabalho, escreverei um algoritmo de reconhecimento de padrões que indique quais eventos apresentam tanques com o sinal característico desejado e em seguida compararei o índice de correlação entre os dados, a fim de identificar os casos em que o sinal procurado aparece em mais de um tanque, possibilitando assim identificar os eventos de interesse. Após esse filtro, tentarei caracterizar esse padrão buscando semelhanças ou tendências como a energia, o tipo da partícula primária e a direção de chegada.

**Palavras-chave:** Reconhecimento de padrões. Selecionar eventos. Pierre Auger.

### Referências:

1 ABRAHAM, J. et al. Properties and performance of the prototype instrument for the Pierre Auger Observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, v. 523, p. 50-95, 2004. doi: 10.1016/j.nima.2003.12.012.

2 THOMSON, M. **Modern particle physics**. New York: Cambridge University Press, 2013. 554 p.





## PG25

# Density functional theory study of the role of the alkali and chalcogen atoms on the stability of quaternary chalcogenides $A_2M^{II}M_3^{IV}Q_8$

BESSE, R.<sup>1</sup>; DA SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>

rafael.besse@usp.br

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

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Layered chalcogenide compounds are good candidates to obtain two-dimensional materials, which have attracted great attention for potential technological applications and advances in basic science. Because of the structural diversity among chalcogenides, a good description of the factors that influence the stability of layered structures is desired, specially for complex compositions, such as ternary and quaternary materials. (1) To improve the atomistic understanding of the major roles that affect the formation of layered quaternary chalcogenides, we performed density functional theory calculations with van der Waals corrections for the  $A_2ZnSn_3Q_8$  materials ( $A = Li, K, Cs$ ;  $Q = S, Se, Te$ ), employing three experimental layered and three-dimensional crystal structures. The calculations yield equilibrium lattice parameters that are in good agreement with experimental data, and therefore provide a good description of the structural properties. (2) Our results show that the atomic radii of the alkali metal and chalcogen species play an important role in the stability of the structures. The layered structures are favored for compositions in which the average of the atomic radii of A and Q are in the regions of smaller or larger values, while the closed three-dimensional structures are the most energetically stable in the intermediate region. These results can be explained based on the minimization of strain, that tends to favor the less compact structures for larger atoms, and its interplay with the coulomb repulsion of the anionic framework. This understanding can help to guide the search for layered quaternary chalcogenide materials.

**Keywords:** Chalcogenides. Layered materials. Density functional theory.

### Referências:

1 BESSE, R.; SABINO, F. P.; DA SILVA, J. L. F. Electronic structure of layered quaternary chalcogenide materials for band-gap engineering: The example of  $Cs_2M^{II}M_3^{IV}Q_8$ . **Physical Review B**, v. 93, n. 16, p. 165205-1-165205-9, 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.93.165205.

2 BESSE, R.; DA SILVA, J. L. F. The role of the alkali and chalcogen atoms on the stability of the layered chalcogenide  $A_2M^{II}M_3^{IV}Q_8$  ( $A = \text{alkali-metal}$ ;  $Q = \text{chalcogen}$ ) compounds: a density functional theory investigation within van der Waals corrections. **Journal of Physics: condensed matter**. Submitted.



## PG26

# Caracterização funcional da proteína spliceossomal CRN e de suas interações em *Trypanosoma brucei*.

BORALLI, C. M. S.<sup>1</sup>; SILVA, M. T. A.<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

camila.boralli@usp.br

<sup>1</sup>Instituto 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), além de inúmeros fatores associados. A montagem do spliceossomo e catálise do *splicing* ocorrem em um processo ordenado de várias etapas, que inclui vários rearranjos conformacionais. Em tripanossomatídeos, onde os genes são transcritos em longas unidades policistrônicas, a reação de *trans-splicing* é requerida para geração de transcritos monocistrônicos maduros, processo que ocorre concomitantemente a poliadenilação na extremidade 3'. Durante o *trans-splicing*, um pequeno miniéxon não codificante, conhecido como *spliced leader* (SL) RNA é adicionado a cada éxon. (1) Recentemente, o uso de purificação por afinidade em tandem de complexos de *splicing* nesses organismos combinada à espectrometria de massas tem possibilitado a identificação de proteínas copurificadas, resultando na caracterização de várias das partículas ribonucleoproteicas envolvidas no *trans-splicing*. Muitas dessas proteínas identificadas ainda não foram estudadas e um dos exemplos é o fator de *splicing* CRN, cujo nome vem do gene *crooked neck* de *Drosophila sp.* (2) A mesma possui homólogas estudadas em levedura e humano onde é membro do complexo Prp19 (NTC), e demonstrou mediar a ativação do spliceossomo. A proteína CRN é altamente conservada em toda a escala evolutiva, e a sua sequência apresenta repetições de domínios HAT (Half-A-TPR - *tetratricopeptide repeats*) em tandem, presente em várias proteínas de ligação a RNA. (3) Dentre os objetivos desse projeto estão a caracterização dos parceiros de interação da proteína utilizando a técnica de purificação em tandem e avaliação por *primer extension* do snRNA associado ao complexo purificado, a caracterização funcional da proteína utilizando a técnica de RNA de interferência aliado a construção de uma curva de crescimento das culturas a partir de linhagens RNAi induzidas e não induzidas, a qPCR para análise da redução do mRNA do respectivo gene silenciado, RT-PCR semi-quantitativa para avaliar potenciais defeitos de *splicing* decorrentes do silenciamento do gene de interesse além da análise por *primer extension* para avaliar influência do silenciamento sobre snRNAs e SL RNA, e por fim, imunolocalização das proteínas pela técnica de Imunofluorescência Indireta (IFI). Assim, a realização desse projeto pode trazer informações importantes para o melhor entendimento do papel dessa proteína na reação de *trans-splicing*.

**Palavras-chave:** *Trypanosoma brucei*. *trans-splicing*. CRN.

### Referências:

1 GUNZL, A . The pre-mRNA splicing machinery of trypanosomes: complex or simplified?. **Eukaryotic Cells**, v. 9, n. 8, p. 1159-1170, 2010. doi: 10.1128/EC.00113-10.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 AMBROSIO, D.L. et al. Spliceosomal proteomics in *Trypanosoma brucei* reveal new RNA splicing factors.. **Eukaryotic Cells**, v. 8, n. 7, p. 990-1000, 2009. doi: 10.1128/EC.00075-09.

3 Chen, H. C. et al. Structural requirement of Ntc77 for spliceosome activation and first catalytic step. **Nucleic Acids Research**, v. 42, n. 19, p. 12261-12271, 2014. doi: 10.1093/nar/gku914.



## PG27

# Paper-based biosensor for the quantification of blood biomarkers for Alzheimers disease

BRAZACA, L. C.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

lais.brazaca@usp.br

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

Alzheimer's disease is the most common degenerative disease in the world, currently affecting 36 million people. (1) It is mainly caused by the accumulation, in neurons, of proteic plaques composed by  $\beta$ -amyloid fragments and by the formation of agglomerates of Tau protein. (2) These complexes affect the functioning of neurons mostly through the interruption of nervous stimuli or leading to cell death. The accurate diagnosis of the disease is still a complex task, depending on psychological analysis acting in conjunction with imaging techniques and analyzes of cerebrospinal fluid. The set of techniques used for accurate diagnosis is still of difficult access to a great part of the population due to its high cost and the need for specialized equipment and researchers. The development of simple and low cost tools to assist in the diagnosis of Alzheimer's disease is of high interest to health systems. We propose the development of a paper-based electrochemical biosensor for simultaneous quantification of 3 blood biomarkers of Alzheimer's disease - fetuin B, clusterin and and pancreatic hormone precursor. (3) For this, specific antibodies for each protein labeled with gold nanoparticles (AuNPs) are used with paper platforms composed of nitrocellulose, cellulose and glass fiber. The AuNPs are subsequently electrochemically quantified through the use of screen-printed carbon disposable sensors and stripping voltammetry, resulting in indirect values for the concentration of analytes. To date, we obtained a calibration curve with good linearity ( $R^2 = 0.985$  for the height of the gold oxidation peaks and  $R^2 = 0.996$  for the area) to AuNPs concentrations between 3.49 and 0.35  $\mu\text{g}/\text{ml}$ . The detection showed high sensitivity and stability, with detection limits of 0.18 and 0.25  $\mu\text{g}/\text{mL}$  for the height and area of gold oxidation peaks, respectively. It is expected that development of these devices may increase the accuracy and the number of diagnoses of the disease, especially in early cases.

**Keywords:** Biosensor. Alzheimer. Nanoparticles.

### Referências:

- 1 ALZHEIMER MED. **Quantas pessoas sofrem de Alzheimer no mundo e no Brasil?**. Disponível em: <<http://www.alzheimermed.com.br/perguntas-e-respostas/quantas-pessoas-sofrem-de-doenca-de-alzheimer-no-mundo-e-no-brasil>>. Acesso em: 23 ago.2016. .
- 2 HUANG, Y.; MUCKE, L. Alzheimer mechanisms and therapeutic strategies. **Cell**, v. 148, p. 1204-1222, 2012. doi: 10.1016/j.cell.2012.02.040.
- 3 SATTLECKER, M. et al. Alzheimer's disease biomarker discovery using SOMAscan multiplexed protein technology. **Alzheimer's Dementia**, v. 10, n. 6, p. 724-734, 2014. doi: 10.1016/j.jalz.2013.09.016.



## PG28

### Quantum thermal machines

CHERUBIM, C. F.<sup>1</sup>; BRITO, F.<sup>1</sup>

cfcherubim@hotmail.com

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

What features of a thermal machine makes it quantum? (1) How could we distinguish it from their classical counterparts? Looking for an answer at current literature, the quantum heat engines apparently have remarkable similarities with the macroscopic systems described by classical thermodynamics. But, could we completely describe any effects at quantum thermal machines only with classical thermodynamics and stochastic analysis? In a recent work, Raam Uzdin, et. al. (2) obtained two results in this direction. The first and main result shows that all quantum engine types are thermodynamically equivalent, that is, its thermodynamic quantities acquire the same value after a cycle up to third order at the norm action, a quantity which values depends on the bath-system coupling and driving field strength. This equivalence is attained because only a coherent mechanism in work extraction is important at small norm action, forcing us to look at this phenomenon in chasing for quantum clues at thermal machines. The second result sets an upper bound limit for the power output, which would only be surpassed if the system had quantum features (coherence) at hand. This upper bound could be used as a signature of a quantum heat engine, throwing some light into these questions concerning the differences between classical and quantum heat engines. Both results are valid at weak bath-system coupling and weak driving field exposure. Considering the importance of these questions we are going to propose an implementation of these results at a specific experiment, a qubit-coupled nanomechanical device that consists of an ultra-high-frequency nanoresonator and superconducting transmon qubit embedded in a circuit QED architecture. (3)

**Keywords:** Quantum thermodynamics. Quantum signature. Quantum heat engine.

#### Referências:

- 1 GEMMER, J. ; MICHEL M. ; MAHLER, G. **Quantum thermodynamics:** emergence of thermodynamic behavior within composite quantum systems. Berlin: Springer, 2010. 346 p.
- 2 UZDIN, R.; LEV, Y.; KOSLOFF R. Equivalence of quantum heat machines, and quantum-thermodynamic signatures. **Physical Review X**, v. 5, n. 3, p. 031044, 2015. doi: 10.1103/PhysRevX.5.031044.
- 3 ROUXINOL, F. et al. Measurements of nanoresonator-qubit interactions in a hybrid quantum electromechanical system. **Nanotechnology**, v. 27, n. 36, p. 1-11, 2016. doi: 10.1088/0957-4484/27/36/364003.



## PG29

# Análise e melhoria de um sistema de aquisição de pressão intracraniana não invasiva wireless

BRUNELLI, R.<sup>1</sup>; ANDRADE, R. A. P.<sup>2</sup>; MASCARENHAS, S.<sup>1</sup>

digon.brunelli@gmail.com

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

<sup>2</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

A Pressão intracraniana (PIC) é um dos parâmetros fisiológicos mais importantes para animais e humanos, sua morfologia é tão ou mais importante que seu valor absoluto (1), pois a variação da morfologia pode indicar possíveis patologias como o traumatismo cranioencefálico verificado em 99.580 casos, Hemorragia Intracerebral em 32.883 casos, acidente vascular encefálico (AVC) com 523.695, AVC não especificado contando com 124.080. Constatando 66% do total de eventos neurológicos que foram registrados no Brasil em 2012. (2) Este trabalho analisa e sugere melhorias em um Sistema de Aquisição de Pressão Intracraniana não Invasiva Wireless, tornando-o mais eficiente, seguro, prático com a mobilidade e autonomia desejada. Os sistemas eletrônicos de aquisição dos sinais fisiológicos estão sendo embarcados em uma plataforma Intel Edison que será responsável pelo recebimento, tratamento, criptografia e envio dos sinais sem fio, para as plataformas de leitura e armazenamento dos dados. (3) Um estudo de eficiência de recebimento e transmissão dos dados sincronizados será realizado desde a conversão analógica digital dos sinais, até a entrega dos pacotes wireless para as plataformas de leitura, levando em consideração o consumo de energia. Utilizando o Intel Edison foi possível transmitir via UDP 1000 pacotes de dados por segundo, sem perda de pacote e sem gerar aumento do atraso fim-a-fim. Com isso o sistema deverá ser capaz de transmitir o sinal de até 24 canais com 24 bits de resolução a uma taxa de aquisição de 16 kHz para cada canal. Para o monitoramento em humano, o sistema será vestível, possibilitando uma autonomia de 24 horas com o auxílio de uma bateria recarregável universal. O dispositivo terá um backup de até 168 horas de dados.

**Palavras-chave:** Pressão intracraniana. Instrumentação médica. Monitoramento não invasivo.

### Referências:

1 CZOSNYKA, M. et al. Intracranial pressure: more than a number. **Neurosurgical Focus**, v. 22, n. 5, p. E10-1-E10-7, 2007.

2 BRASIL. Ministério da Saúde. Sistema Único de Saúde. Departamento de Informática do SUS. **Procedimentos hospitalares do SUS:** por local de internação - Brasil. Disponível em: <<http://tabnet.datasus.gov.br/cgi/deftohtm.exe?sih/cnv/qiuf.def>> Acesso em: 18 ago. 2016.

3 ANDRADE, R. A. P. **Análise e melhoria de um sistema não invasivo de monitoramento da pressão intracraniana.** 2013. 151 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Escola de



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.



## PG30

# Caracterização estrutural da enzima FOLD de *Xanthomonas albilineans*: alvo molecular para triagem de compostos bioativos inibidores da biossíntese de folatos

BUENO, R. V.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

renata.bueno@usp.br

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

A escaldadura das folhas, causada pela bactéria *Xanthomonas albilineans* (Ashby) Dowson, é uma das cinco doenças mais importantes que atingem a cana-de-açúcar resultando em significativa diminuição da produtividade, queda da qualidade do caldo extraído e necessidade de reforma precoce dos canaviais. (1) A ausência de agentes químicos ou biológicos para o tratamento dessa doença somada ao impacto da escaldadura das folhas na produção de cana-de-açúcar estimula a pesquisa de moléculas bioativas candidatas a novos defensivos agrícolas. A biossíntese de folatos, essencial para a replicação bacteriana, é uma via metabólica interessante para o planejamento de inibidores. (2) Nessa via, destaca-se a enzima N5,N10 metilenotetrahidrofolato desidrogenase ciclohidrolase (FolD) como alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de novos inibidores. (3) O atual projeto de pesquisa visa a elucidação da estrutura tridimensional da FolD de *X. albilineans* (XaFolD) na forma apo e em complexo com o cofator, bem como a descoberta de inibidores potentes e seletivos como candidatos a novos agroquímicos para cultura da cana-de-açúcar. Até o presente momento foram realizadas as etapas de clonagem, expressão, purificação, caracterização cinética e cristalização da XaFolD. A elucidação estrutural da XaFolD na forma apo foi conduzida a partir de cristais de submetidos à difração de raios X, coleta e processamento dos dados e determinação da estrutura tridimensional por substituição molecular na resolução de 2,1 Å. 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. Atualmente estão sendo realizados experimentos de cristalização da XaFolD complexada ao cofator NADP<sup>+</sup>, a fim de elucidar a mudança conformacional induzida pela formação do complexo e explorar a estrutura da XaFolD para a triagem de inibidores. A caracterização cinética da atividade desidrogenase da XaFolD, por sua vez, revelou o valor de KM para o substrato N5,N10 metileno THF ( $KM = 50 \pm 10 \mu M$ ) e cofator NADP<sup>+</sup> ( $KM = 668 \pm 81$ ), permitindo o delineamento de um ensaio espectrofotométrico direto para a identificação de inibidores enzimáticos. A caracterização estrutural e cinética da XaFolD fornece bases para explorar essa enzima como um alvo molecular para a triagem e descoberta de inibidores através da associação de ensaios de alto rendimento (HTS, do inglês *High Throughput Screening*) e métodos de triagem virtual (VS, do inglês *Virtual Screening*). Os ligantes identificados por essas estratégias serão caracterizados por métodos biofísicos e cinéticos para melhor compreensão das interações moleculares e do modo de inibição. Os inibidores mais potentes de XaFolD serão avaliados *in vitro* contra *X. albilineans*.

**Palavras-chave:** Escaldadura das folhas. *Xanthomonas albilineans*. FOLD.

**Referências:**





- 1 DAVIS, M. J. et al. Intraspecific genomic variation within *Xanthomonas albilineans*, the sugarcane leaf scald pathogen. **Phytopathology**, v. 87, n. 3, p. 316-324, 1997. doi: 10.1094/PHYTO.1997.87.3.316.
- 2 BOURNE, C. R. Utility of the biosynthetic folate pathway for targets in antimicrobial discovery. **Antibiotics**, v. 3, n. 1, p. 1-28, 2014. doi: 10.3390/antibiotics3010001.
- 3 EADSFORTH, T. C. et al. Assessment of *Pseudomonas aeruginosa* N5, N10 methylenetetrahydrofolate dehydrogenase cyclohydrolase as a potential antibacterial drug target. **PLoS One**, v. 7, n. 4, p. e35973-1-e35973-11, 2012. doi: 10.1371/journal.pone.0035973.



## PG31

# Estudo da inativação fotodinâmica pela incorporação de fotossensibilizador induzido em microrganismos

CAFACE, R. A.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

raphael@ifsc.usp.br

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

As reações fotodinâmicas (RF) vem sendo aprimoradas como uma nova tecnologia mais ágil, eficiente e de baixo custo para tratamentos médicos. Seu princípio de aplicação envolve a ativação de um fármaco fotossensibilizador (FS), pela iluminação em uma banda específica de comprimentos de onda, gerando assim espécies reativas altamente citotóxicas causando a morte celular. Neste trabalho será estudado a inativação fotodinâmica (IFD) com aplicações nos tratamentos de descontaminação de microrganismos em infecções localizadas. Sua aplicabilidade é devido a sua seletividade e a não geração de micro-organismos resistentes aos FSs. Apesar desta técnica ser utilizada com sucesso em diversos campos, ela ainda apresenta baixa eficiência quando comparada às técnicas tradicionais. (1) O objetivo deste trabalho será desenvolver um novo protocolo de aplicação da IFD visando o aumento de eficiência, bem como um estudo profundo das interações e monitoramento dinâmica dos FSs com as células mamárias e fúngicas (*Candida Albicans*). Células de *Candida Albicans* interagidas com dois FSs: Photogem® e Curcumina, que apresentaram um aumento da internalização de FS pelas células através de uma pré-iluminação de baixa dose durante o tempo de incubação, visto em ensaios de viabilidade com a levedura e o Photogem®, foi demonstrado que as amostras que tiveram pré-iluminação apresentaram diminuição de até seis ordens de grandeza nas unidades formadoras de colônia quando comparadas com as amostras tratadas pelo protocolo tradicional de IFD. (2) Este projeto tem como objetivo otimizar este protocolo para células de levedura e ampliado sua aplicação para celular animais, que será estudado através das técnicas de microscopia confocal de fluorescência e de imagem de tempo de vida de fluorescência foi possível compreender a interação entre os FSs e as células, bem como estudar a ligação deste FS em diferentes regiões da célula.

**Palavras-chave:** Inativação fotodinâmica. Fotossensibilizador. Tratamentos médicos.

### Referências:

- 1 DOUGHERTY, T. J. et al. Photoradiation therapy II: cure of animal tumors with hematoporphyrin and light. **Journal of the National Cancer Institute**, v. 55, n. 1, p. 115-121, 1975.
- 2 TANG, H. M.; HAMBLIN, M. R.; YOW, C. M. N. A comparative in vitro photoinactivation study of clinical isolates of multidrug-resistant pathogens. **Journal of Infection and Chemotherapy**, v. 13, n. 2, p. 87-91, 2007.



## PG32

# Estudos e desenvolvimento de métodos baseados em harmônicos esféricos para análise de similaridade estrutural entre ligantes

CAIRES, F. R.<sup>1</sup>; MONTALVÃO, R. W.<sup>2</sup>

fernando.caires10@gmail.com

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

<sup>2</sup>Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul - PUCRS

Descritores moleculares são essenciais em muitas aplicações de física e química computacional, como na análise de similaridade entre ligantes baseada em sua estrutura. Harmônicos esféricos têm sido utilizados como descritores da superfície molecular por serem uma forma compacta de descrição geométrica e por possuírem um descritor invariante por rotação. (1) Assim, este trabalho propõe um método de análise de similaridade estrutural entre ligantes no qual se modela a superfície de uma molécula através de uma expansão em harmônicos esféricos realizada pelo programa LIRA. (2) Os coeficientes encontrados são utilizados para percorrer o banco de dados DUD-E, com descritores previamente calculados, utilizando Distância Euclidiana e diversos valores de corte para selecionar compostos mais semelhantes. O potencial do método é avaliado usando o Ultrafast Shape Recognition (USR) como método padrão, pelo fato de ser uma excelente e rápida métrica para análise da similaridade de ligantes. Foram selecionadas 50 moléculas de diferentes tamanhos e composição de forma a representar todos os grupos moleculares presentes na DUD-E. Em seguida, cada molécula foi submetida à busca de similares variando-se valores de corte para o LIRA em que o conjunto de moléculas selecionadas foi comparado com as selecionadas pelo USR através de um processo de classificação binária e criação e interpretação de curvas ROC. (3) Além do benchmarking, foi realizada a análise das componentes principais para determinar quais descritores são os mais importantes e carregam as melhores informações utilizadas na descrição da superfície da molécula. A partir das componentes principais, foi realizado um estudo do uso de funções peso, associando mais importância aos descritores adequados, e a redução da dimensionalidade do banco de dados, seleção de um novo conjunto de autovetores que formam as bases do espaço vetorial e uma nova descrição das moléculas para o novo espaço, no qual cada variação foi avaliada através de um novo benchmarking. O LIRA se mostrou tão rápido quanto o USR e apresentou grande potencial de seleção de moléculas similares, para a maioria das moléculas testadas, pois as curvas ROC apresentaram pontos acima da linha do aleatório. Tanto a redução da dimensionalidade quanto o uso de funções de ponderação agregaram valor à métrica deixando-a mais veloz, no caso da redução da quantidade de descritores, e seletiva, em ambos os casos. Dessa forma, o método proposto se mostrou eficiente em mensurar a similaridade entre ligante de forma seletiva e rápida utilizando somente informações a respeito da superfície molecular.

**Palavras-chave:** Similaridade. Ligantes. Harmônicos esféricos.

### Referências:

1 MAK, L.; GRANDISON, S.; MORRIS, R. J. An extension of spherical harmonics to region-based



rotationally invariant descriptors for molecular shape description and comparison. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 26, n. 7, p. 1035-1045, 2008.

2 GREEN, R. **Spherical harmonic lighting**: the gritty details. Disponível em: <<http://silviojemma.com/public/papers/lighting/spherical-harmonic-lighting.pdf>>. Acesso em: 02 set. 2016.

3 THEODORIDIS, S.; KOUTROUMBAS, K. **Pattern recognition**. 4th ed. Burlington: Academic Press, 2008. 984 p.



## PG33

# Clonagem, expressão heteróloga e caracterização de enzima arabinofuranosidase de *Thielavia terrestris* envolvida na degradação da biomassa lignocelulósica

CAMARGO, S.<sup>1</sup>; MUNIZ, J. R. C.<sup>1</sup>

suelen.camargo@usp.br

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

São consideradas enzimas hidrolíticas, por plena definição, aquelas com a capacidade de realizar a reação de hidrólise, a qual se entende por quebra de uma molécula pela água. Pela capacidade de degradar substâncias naturais, as enzimas hidrolíticas são de larga utilização industrial, podendo se expandir nas áreas têxteis, alimentícia, farmacêutica, agrícola e se estendendo até no auxílio da produção de biocombustíveis, sendo o último o foco de aplicação dessa pesquisa. Conhecidas como enzimas que liberam arabinose e arabinofuranose, as L-arabinosils são parte do sistema xilanolítico necessário para romper ligações de arabinoxilanas. Além disso, sua ação de deslignificação é promissora na degradação de biomassa para produção de biocombustíveis. (1-2) O presente projeto busca realizar a clonagem, expressão heteróloga em bactéria e a caracterização de uma  $\alpha$ -L-arabinofuranosidase do fungo *Thielavia terrestris*. Tal organismo tem importância biotecnológica pelo fato de ser termofílico, sendo seus produtos proteicos resistentes a temperaturas acima de 40°C, uma ótima opção para aplicar em processos industriais que funcionam a elevadas temperaturas. A enzima estudada pertence a família GH62, a qual é conhecida por intensificar a ação de celulasas, sendo assim de interesse na degradação de biomassa lignocelulósica como o bagaço de cana de açúcar. A proteína estudada será caracterizada bioquímica e estruturalmente a fim de se entender o seu mecanismo e condições ótimas de ação. Os ensaios biofísicos, bioquímicos e estruturais buscam promover um entendimento dos mecanismos de ação dessa enzima e sua aplicação na hidrólise do bagaço de cana-de-açúcar.

**Palavras-chave:** Celulase. *Thielavia terrestris*. Biomassa lignocelulósica.

### Referências:

- 1 FLIPPHI, M. J. et al. Arabinase gene expression in *Aspergillus niger*: indications for coordinated regulation. **Microbiology**, v. 140, n. 10, p. 2673-2682, 1994. doi: 10.1099/00221287-140-10-2673.
- 2 SAHA, B. C.  $\alpha$ -L-arabinofuranosidases: biochemistry, molecular biology and application in biotechnology. **Biotechnology Advances**, v. 18, n. 5, p. 403-423, 2000. doi: 10.1016/S0734-9750(00)00044-6.



## PG34

# Investigation of photodynamic therapy in three-dimensional culture of breast cancer

CAMPOS, C. P.<sup>1</sup>; INADA, N.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

carolinapancampos@gmail.com

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

Breast cancer is the most diagnosed type and compared to other types of cancer it is the leading cause of death for women worldwide. In Brazil, according to the National Cancer Institute in 2016 are expected 57,960 new cases of breast cancer. The recurrence of the tumor after mastectomy is a challenge for having few treatment options. Photodynamic therapy (PDT) is a noninvasive technique, which consists in the combination of light, a photosensitizer (PS) and molecular oxygen and has been used in clinical trials as a treatment for metastatic breast tumor. (1) Studies of therapies to combat tumor formation is initially performed in *in vitro* trials that mimic the cells behavior in organisms tissues. Cells grown in monolayer (two-dimensional culture - 2D) are routinely used as a conventional model prior to animal studies and human clinical trials. However, the 2D culture not sufficiently recreates the original environment of the cell in the tissue. The limitations of monolayer culture include the lack of cell-cell signaling and cell-extracellular matrix, and these signals are essential for cell differentiation, proliferation and other cellular functions. (2) In this scenario, the three-dimensional cultures (3D) emerge to fill that gap. Currently, different types of 3D culture are developed, for example, spheroids, scaffolds of synthetic polymers and gels of protein substrates and more recently magnetic levitation model (MLM). (3) The MLM was developed as a relatively inexpensive and simple method for maintaining the cells in suspension. Thus, this model allows unrestricted space cell growth and nutrient transfer, it is compatible with conventional 2D culture, it allows the usual *in vitro* cells analysis, it is fast, forming the tumor within few hours and is able to synthesize extracellular matrix during its formation. The objective of this study is the characterization of the MLM with breast tumor cells and its use in the investigation of PDT effects using different PS. The initial results of growth characterization in 24 and 96-well plate showed an increase in optical density in the central region of the tumor with time and no area growth. We defined a minimum growth time to start experiments with PS. The next steps are the cytotoxicity test of protoporphyrin IX in the dark to determine non-toxic concentrations to test PDT. Moreover, tumors will be inserted into chick egg chorioallantoic membrane to investigate the interaction of the tumor with blood vessels.

**Keywords:** Photodynamic therapy. Magnetic levitation model. Breast cancer.

### Referências:

1 SHISHKOVA, N.; KUZNETSOVA, O.; BEREZOV T. Photodynamic therapy for gynecological diseases and breast cancer. **Cancer Biology and Medicine**, v. 9, n. 1, p. 9-17, 2012. doi: 10.3969/j.issn.2095-3941.2012.01.002.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 LEE, J.; CUDDIHY, M. J.; KOTOV, N. A. Three-dimensional cell culture matrices: state of the art. **Tissue Engineering Part B**, v. 14, n. 1, p. 61-86, 2008. doi: 10.1089/teb.2007.0150.

3 HAISLER, W. L. et al. Three-dimensional cell culturing by magnetic levitation. **Nature Protocols**, v. 8, n. 10, p. 1940-1949, 2013. doi: 10.1038/nprot.2013.125.



## PG35

# Spin-orbit coupling effects in nanowires using multiband $k \cdot p$ method

CAMPOS, T.<sup>1</sup>; FARIA JUNIOR, P. E.<sup>1</sup>; GMITRA, M.<sup>2</sup>; SIPAHI, G. M.<sup>1</sup>; FABIAN, J.<sup>2</sup>

tiago.campos@usp.br

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

<sup>2</sup>Institute for Theoretical Physics - Regensburg University

Spintronics using semiconductor nanowires have gained a lot of attention recently, in special because it can be a viable setup to study exotic states of matter like the Majorana fermions. (1) The study of spin-orbit coupling in nanowires is usually carried out by simplistic two-band models. Although they have been successful in determine some physical properties, a more realistic description of the spin-orbit coupling of interacting energy bands is required to further investigate quantum confined systems. In this study, we use multi-band  $k \cdot p$  Hamiltonians, including spin-orbit coupling (2-3), to determine the band structure of zincblende InSb and wurtzite InAs nanowires under a transverse electric field. We analyze the effects of the lateral quantum confinement, for different cross-section geometries, and growth direction in the energy bands and extract the pertinent parameters that can be used in two-band models. We found that the electric field boost the spin split near the Brillouin zone center for both crystal structures and can be highly tunable, whereas without electric field the zincblende InSb spin split is driven by increasing the quantum confinement and the wurtzite InAs spin split by changing the growth direction. In conclusion, our systematic investigation of nanowires shows that the spin-orbit coupling strength can be fine tuned by the external electric field in experimentally achievable setups that ultimately could guide the search for the Majorana modes.

**Palavras-chave:** k.p method. Spin-orbit. Nanowires.

### Referências:

1 ALICEA, J. New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems. **Reports on Progress in Physics**, v. 75, n. 7, p. 076501-1-076501-36, 2012.

2 FARIA JUNIOR, P. E. et al. Realistic multiband k.p approach from ab initio and spin-orbit coupling effects of InAs and InP in wurtzite phase. **Physical Review B**, v. 93, n. 23, p. 235204-1-235204-14, 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.93.235204.

3 WINKLER, R. **Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems**. Berlin: Springer, 2003. 228 p.





## PG36

# Edge states appearance in non-topological cylindrical quantum dots

CANDIDO, D. R.<sup>1</sup>; EGUES, J. C.<sup>1</sup>

denisricardocandido@gmail.com

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

The Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) effective model (1) describes the low-energy physics of a HgTe/CdTe quantum well, the first 2D Topological Insulator (TI) discovered in nature. Motivated by the lack of studies in cylindrical geometries and by the recent work done on III-V dots (2), we solve analytically the BHZ model confined by a cylindrical hard wall using the modified Bessel functions. By solving a transcendental equation following from the appropriate boundary conditions to the problem, we determine all the energies of the system. The wave functions are found to have an analytical closed form, which enhances the fundamental understanding of the origin of the edge states and makes it easier to carry out transport calculations. Surprisingly, we show that counter propagating edge states are still found in the trivial or non-topological regime in both conduction and valence states. We have also calculated the circulating currents for system parameters spanning both the trivial and non-trivial regimes.

**Keywords:** Topological insulator. Bhz model. Quantum dot.

### Referências:

1 BERNEVIG, B. et al. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. **Science**, v. 314, p. 1757-1761, 2006. doi: 10.1126/science.1133734.

2 BREE, J. van et al. Geometric and compositional influences on spin-orbit induced circulating currents in nanostructures. **Physical Review B**, v. 90, p. 16, 2014. doi: 10.1103/PhysRevB.90.165306.



## PG37

# Expansão perturbativa de QCD na rede

CARVALHO, L. F.<sup>1</sup>; MENDES, T.<sup>1</sup>; CUCCHIERI, A.<sup>1</sup>

leo.fc.tavola@gmail.com

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

A QCD (sigla em inglês para Cromodinâmica Quântica) é a teoria atualmente aceita para o estudo da interação forte, e é formulada em termos de Quarks e Glúons que acreditamos serem os constituintes básicos da matéria hadrônica. (1-2) Essa teoria obteve bastante sucesso na descrição de colisões de alta energia, pois nesse regime a constante de acoplamento é pequena o que permite uma expansão perturbativa das interações. Por outro lado, na escala de energia típica do universo hadrônico (em torno de 1 GeV), a constante de acoplamento é da ordem da unidade e por isso os métodos perturbativos falham ao descrever a teoria. Nesse limite, a QCD na rede (Lattice QCD) é a principal ferramenta para o cálculo dos espectros hadrônicos e para os elementos de matriz dos operadores que atuam nesses estados. (1-2) A teoria de perturbação aplicada à constante de acoplamento fraca, pode ser usada para o estudo da QCD no contínuo. Isso porque a QCD possui uma propriedade chamada liberdade assintótica. Por outro lado, a QCD na rede é uma ferramenta desenvolvida para o estudo de fenômenos não perturbativos, como o confinamento hadrônico, cálculo da massa dos hádrons, elementos de matriz em processos hadrônicos. Dessa maneira, o estudo de teoria de perturbação em acoplamento fraco, para a QCD, se justifica pelo fato de que a regularização de uma teoria invariante de gauge, com um corte de rede (lattice cutoff), inclui diversos vértices irrelevantes, que não possuem nenhum vértice análogo no limite do contínuo. Apesar desses vértices não contribuírem no limite do contínuo, um número finito deles irão contribuir, em diversas ordens, para a função de Green, no limite do espaçamento de rede indo a zero. Assim o número de diagramas de Feynman, a ser considerados, é maior no estudo de rede do que no limite contínuo. Porém, os integrando das integrais de Feynman são agora funções periódicas no espaço dos momentos, e os teoremas de contagem de potência da formulação no contínuo, necessários para um programa renormalizável não se aplicam. Então a priori as teorias de gauge na rede não são necessariamente renormalizáveis. (3) A complexidade das expressões em QCD na rede perturbativa é consequência da regularização de rede invariante por transformações de gauge, que como no caso da simetria U (1), resulta em um número infinito de vértices descrevendo a interação. Porém no caso de uma teoria com estrutura não abeliana, esses vértices são ainda mais complicados. Tomando um limite para o contínuo, de maneira ingênua, somente aqueles vértices que contribuem no contínuo sobrevivem. Por essa razão, devemos ter um cuidado especial ao incluir artefatos de rede na ação, pois esses irão contribuir para as funções de correlação nesse limite. (3)

**Palavras-chave:** Lattice QCD. Quantum field theory. Perturbative expansion.

### Referências:

1 GROSS, D. J.; WILCZEK, F. Ultraviolet behavior of non-abelian gauge theories. **Physical Review Letters**, v. 30, n. 26, p. 1343-1346, 1973.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Constraints on the infrared behavior of the gluon propagator in Yang-Mills theories. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 24, p. 241601-1-241601-4, 2008.

3 ROTHE, H. J. **Lattice gauge theories**: an introduction. 4th ed. Singapore: World Scientific, 2012. 606 p.



## PG38

# Neuronal avalanches as signatures for hippocampal in vivo recordings and their simulations

CARVALHO, M. M.<sup>1</sup>; FUKAI, T.<sup>2</sup>; MAIA, L. P.<sup>1</sup>

milena.carvalho@usp.br

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

<sup>2</sup>RIKEN Brain Science Institute (RIKEN BSI)

In hippocampal CA1 and CA3 regions, various properties of neuronal activity follow skewed, lognormal-like distributions, including average firing rates, rate and magnitude of spike bursts, magnitude of population synchrony, and correlations between pre- and postsynaptic spikes. (1) In recent studies, lognormal features of hippocampal activities were well replicated by a multi-timescale adaptive threshold (MAT) neuron network with low-frequency spontaneous activity (2), though it remains unknown whether and how other neuronal and network properties can be replicated in this model. In this study we characterize neuronal avalanches in large-scale recordings of hippocampal subregions in waking and sleeping rats and investigate its compatibility to neuronal avalanche distributions of MAT neuron network simulations. Both show temporal binning and thresholding sensitivity higher than expected, and bumps can easily appear in the distributions' tail by increasing the temporal bin or decreasing the threshold. Moreover, by using Kolmogorov-Smirnov (KS) tests to compare avalanche size distributions among different behavioral activities and simulations, our findings show that two avalanche size distributions present higher similarity when both samples belong to the same behavioral class, thus serving as an identification method. Nevertheless, none of the studied behaviors (waking rat in linear and square maze, sleeping rat) has so far showed to be a perfect match to simulation distributions. These results show the comparison between the MAT neuron network and hippocampal readings in a different scale than shown before, providing more insight into the mechanisms behind activity in hippocampal subregions.

**Keywords:** Hippocampus. CA3. 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. **Journal of Neuroscience**, v. 35, n. 43, p. 14585-14601, 2015. doi: 10.1523/JNEUROSCI.4944-14.2015.



## PG39

# Experimental production of a Bose-Einstein condensate of sodium atoms

CASTILHO, P. C. M.<sup>1</sup>; PEDROZO-PENAFIEL, E.<sup>1</sup>; MERCADO-GUTIERREZ, E. D.<sup>1</sup>; FARIAS, K. M.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

patricia.cmcastilho@gmail.com

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

The design and build up of the experimental setup for producing a two-species Bose-Einstein condensate (BEC),  $^{23}\text{Na}$ - $^{41}\text{K}$ , with tunable interactions is the fundamental part of this Phd project. Normally, many stages are needed in the way to the BEC and even more complex are the experimental sequences of mixture experiments. In the case of the NaK experiment we are building up, the first step in the path to obtain the two-species BEC, was to produce a pure condensate of sodium atoms trapped in a Plug trap. (1) The standards techniques for sodium atoms, such the use of a Dark-SPOT MOT, in addition to the new 2D-MOT designed by a group in Trento (2) were combined in our experiment in order to obtain a BEC of  $1 \times 10^6$  atoms at less than  $1\mu\text{K}$ . In this work, we present the characterization of the Bose-Einstein condensate of sodium atoms and the initial attempts to sympathetic cool the  $^{41}\text{K}$  atoms with the  $^{23}\text{Na}$  in the Plug trap.

**Palavras-chave:** Bose-Einstein condensate. Trapped atoms. Plug trap.

### Referências:

1 DAVIS, K. B. et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 22, p. 3969-3973, 1995.

2 LAMPORESI, G. et al. Compact high flux source of cold sodium atoms. **Review of Scientific Instruments**, v. 84, n. 6, p. 063102-1-063102-7, 2013.



## PG40

# On the structural characteristics of some transcriptional regulators complexed to DNA and the conformational changes this binding requires.

CÂMARA, A. S.<sup>1</sup>; HORJALES REBOREDO, E.<sup>1</sup>

amanda.camara@usp.br

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

The complexity of a living organism is not proportional to its number of genes. In fact, “natural selection operates on phenotypes rather than genotype” (1), and the more easily an organism adapts to the changes in physiological and environmental conditions, the more chances it has to survive and reproduce. Therefore, some mechanisms exist to ensure proper and sensitive genetic expression. Transcriptional regulation is one of them. And due to its combinatorial nature, it enhances regulatory complexity, diversity and physiological and behavioural complexity. (2) This combinatorial nature means that macro and micro biomolecules may gather in countless ways to form a unique structure that specifically binds to a DNA site. This binding depends not only on recognizing a base sequence, but also on adopting a conformation that is compatible with the geometry and charge distribution of the DNA double helix. We analyse here some simple and homodimeric transcriptional regulators (TR), which present a very common motif, the helix-turn-helix (HTH). This motif interacts with the DNA both specifically and non-specifically, and in a homodimer, where it appears twice in the same biological unit, they are symmetrically placed in a way that two helices fit exactly into two consecutive major grooves of the DNA. These proteins are also allosterically regulated, which means the DNA-binding site goes through large conformational changes upon the binding of a different ligand on a distant site. This is a simple example of the combinatorial nature of the transcriptional regulation. Alone a TR has very low probability of binding to DNA, but if another ligand, macro or micro, binds to its allosteric site, this probability is changed and binding is enhanced by the conformational changes. Thus, we focused on identifying structural and conformational characteristics of some TR complexed to DNA, which structures are present on the Protein Data Bank. We analyse characteristics such as: distance and orientation between the recognition helices; the arrangement of residues in these helices; the bases they interact with; the extent of the DNA site; and the presence of palindromic sequences. With these informations, it maybe possible to predict the conformation of the DNA-binding motif of a TR while complexed to DNA, if only its apo conformation and its DNA-site sequence are known. And therefore, we propose a model for a TR structure our group has recently resolved, calculated as a linear combination of harmonic modes simulated for this protein in the apo conformation. These harmonic modes of low frequency, which collectively moves large groups of atoms, are likely to represent functional motions of the protein (3), and also the allosteric transition that occurs upon the binding of the allosteric ligand. By identifying the motion required to change the conformation of the DNA-binding motif, we also identify modifications in the allosteric site, and thus we can also predict stereo-chemical characteristics of an allosteric ligand still unknown. If a ligand with these characteristics is experimentally confirmed to bind to this TR, this maybe a novel procedure to predict drugs that affect transcriptional regulation.



**Keywords:** Transcriptional regulation. Conformational changes. Allosteric transition.

**Referências:**

- 1 JAROSZ, D. F.; TAIPALE, M.; LINDQUIST, S. Protein homeostasis and the phenotypic manifestation of genetic diversity: principles and mechanisms. **Annual Review of Genetics**, v. 44, p. 189-216, 2010. doi: 10.1146/annurev.genet.40.110405.090412.
- 2 LEVINE, M.; TIJAN, R. Transcription regulation and animal diversity. **Nature**, v. 424, n. 6945, p. 147-151, 2003.
- 3 ANSARI, A. et al . Protein states and proteinquakes. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America** , v. 82, n. 15, p. 5000-5004, 1985.



## PG41

# Simulações ambientais e caracterização espectroscópica in-situ de potenciais bioassinaturas moleculares para aplicação em missões espaciais

CERINI, M. F.<sup>1</sup>; RIVAS, N.<sup>1</sup>; GALANTE, D.<sup>1</sup>

fernanda.cerini@lnls.br

<sup>1</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

O presente projeto tem como objetivo a investigação em laboratório da fotoestabilidade e resiliência de biomoléculas em ambientes extraterrestres simulados, usando métodos espectroscópicos. Os resultados serão utilizados para melhor definir as condições de detectabilidade de bioassinaturas espectroscópicas, com aplicações para o desenvolvimento de experimentos de astrobiologia em missões espaciais de pequeno porte e baixo custo. Tais missões estão em andamento pelo grupo de pesquisa no qual o projeto está inserido, que incluem balões estratosféricos e CubeSats. Biomoléculas de importância astrobiológica serão selecionadas entre diversas classes, como aminoácidos, pigmentos biológicos, bases nucleotídicas, porfirinas, Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (PAH) e outras, e serão submetidas a diferentes ambientes simulados (especialmente a superfície de Marte e o ambiente espacial). Os experimentos serão realizados nas instalações do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), em especial na linha de luz TGM (Toroidal Grating Monochromator). Essa estação experimental trabalha na região de raios X mole e ultravioleta de vácuo (3 a 330 eV), e será utilizada para simular as condições do ambiente espacial, medindo mudanças físicas e químicas nas biomoléculas expostas por reflectância no UV-Vis *in-situ* e em função do tempo. Será também utilizada a Câmara de Simulação Espacial e Planetária (AstroCam) do Núcleo de Pesquisa em Astrobiologia da USP (NAP/AstroBio) (1), com a qual outros parâmetros ambientais também poderão ser controlados, como radiação, pressão, composição gasosa e temperatura. As mudanças nas biomoléculas são medidas *in-situ* por análises espectroscópicas e outros métodos convencionais de laboratório.

**Palavras-chave:** Bioassinaturas. Astrobiologia. Simulações ambientais.

### Referências:

1 UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO. Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas. Núcleo de Pesquisa em Astrobiologia. **Astrobiologia**. Disponível em: <<http://www.astrobiobrazil.org/>>. Acesso em: 23 ago. 2016.





## PG42

# Polaron e formação de pares via interação por fônons em misturas atômicas em dimensão mista

CHAVIGURI, R. H.<sup>1</sup>; CARACANHAS, M. A.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

riuspssc@gmail.com

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

Nosso modelo consistirá estudar um sistema em dimensão mista composto de uma mistura férmion-bóson de duas espécies atômicas ultrafrias confinadas em armadilha óptica. A seletividade da armadilha de luz nos permite aprisionar somente uma das espécies em rede óptica unidimensional, enquanto mantemos a segunda espécie em armadilha harmônica tridimensional. (1) Na configuração quase-2D (planos formados pelo potencial da rede óptica 1D), pretendemos aprisionar uma mistura desbalanceada de dois estados hiperfinos do 40K. Essa configuração estará imersa em um banho formado por um condensado de Bose-Einstein de átomos de Na, aprisionado no potencial óptico 3D. Nosso objetivo será estudar os vários fenômenos físicos que podem ser simulados com esse aparato, variando a razão entre as populações dos estados hiperfinos do 40K e também a interação entre as espécies 40K-Na. Com respeito à formação dos pares, nos basearemos no trabalho de Nishida (2), que determinou a formação de pares do tipo onda-p entre férmions polarizados em 2D por excitações partícula-buraco de um mar de Fermi em 3D. No nosso caso, porém, consideraremos um background bosônico, ou seja, os pares onda-p serão formados através da mediação por modos de baixa energia da amostra condensada em 3D. Determinaremos a expressão para o potencial da interação mediada para esse caso em especial e a possibilidade de termos pares onda-p estáveis. (3)

**Palavras-chave:** Condensado de Bose-Einstein. Pares de Cooper. Estados hiperfinos.

### Referências:

- 1 LAMPORESI, G. et al. Scattering in mixed dimensions with ultracold gases. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 15, p. 153202-1-153202-4, 2010.
- 2 NISHIDA, Y. Induced p-wave superfluidity in two dimensions: brane world in cold atoms and nonrelativistic defect CFTs. **Annals of Physics**, v. 324, n. 4, p. 897-919, 2009.
- 3 LEGGETT, A. J. **Quantum liquids**: Bose condensation and Cooper pairing in condensed-matter systems. New York: Oxford University Press, 2006. 404 p.



## PG43

# Controlled polarization of two-dimensional quantum turbulence in atomic Bose-Einstein condensates

CIDRIM, A.<sup>1</sup>; SANTOS, F. E. A. dos<sup>2</sup>; GALANTUCCI, L.<sup>3</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; BARENGHI, C. F.<sup>3</sup>

andrecidrim@gmail.com

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

<sup>2</sup>Departamento de Física - UFSCAR

<sup>3</sup>Joint Quantum Centre Durham-Newcastle; School of Mathematics and Statistics, Newcastle University, Newcastle upon Tyne, United Kingdom

We propose a scheme for generating two-dimensional turbulence in harmonically trapped atomic condensates with the novelty of controlling the polarization (net rotation) of the turbulence.(1) Our scheme is based on an initial giant (multicharged) vortex which induces a large-scale circular flow. Two thin obstacles, created by blue-detuned laser beams, speed up the decay of the giant vortex into many singly-quantized vortices of the same circulation; at the same time, vortex-antivortex pairs are created by the decaying circular flow past the obstacles. Rotation of the obstacles against the circular flow controls the relative proportion of positive and negative vortices, from the limit of strongly anisotropic turbulence (almost all vortices having the same sign) to that of isotropic turbulence (equal number of vortices and antivortices). Using the new scheme, we numerically study the decay of 2D quantum turbulence as a function of the polarization.(2-3) Finally, we present a model for the decay rate of the vortex number which fits our numerical experiment curves, with the novelty of taking into account polarization time-dependence.

**Keywords:** Bose-Einstein condensates. Quantum vortices. Quantum turbulence.

### Referências:

1 CIDRIM, A. et al. Controlled polarization of two-dimensional quantum turbulence in atomic Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 93, p. 033651, 2016. doi: 10.1103/PhysRevA.93.033651.

2 KWON, W.J. et al.. Relaxation of superfluid turbulence in highly oblate Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, v. 90, p. 063627, 2014. doi: 10.1103/PhysRevA.90.063627.

3 GROSZEK, A.J. et al. Onsager vortex formation in Bose-Einstein condensates in two-dimensional power-law traps. **Physical Review A**, v. 93, p. 043614, 2016. doi: 10.1103/PhysRevA.93.043614.



## PG44

# Functional studies of septin of *Chlamydomonas reinhardtii*

CIOL, H.<sup>1</sup>; PINTO, A. P. A.<sup>1</sup>; MACEDO, J. N. A.<sup>1</sup>; ZERAIK, A. E.<sup>1</sup>; ARAÚJO, A. P. U.<sup>1</sup>

heloisa.ciol@usp.br

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

Septins are proteins that bind guanine nucleotides and form filaments, which can assemble in high order structures. (1) They were originally discovered in yeast as being required for the accomplishment of the cell cycle, but their action mode and precise functions in other organisms remain unclear. *Chlamydomonas reinhardtii*, a unicellular green alga, has a single septin (2) and might help to elucidate the role of this protein in ancestral eukaryotic organisms. In this context, we used the yeast two-hybrid assay (Y2H) technique to find potential partner proteins to septins. To complement the functional study of this protein, we also knocked down the septin gene with artificial micro-RNA (amiRNA) and used immunofluorescence staining to localize the protein *in situ*. The Y2H assay returned two possible partner proteins to septins: S Adenosyl Homocysteine Hydrolase (SAHH) and Subtilase like Serine Protease, both described in the flagellar proteome in *Chlamydomonas* (3), which correlates to the localization of the protein *in situ*. The immunostaining assay showed that septin is distributed in groups throughout the cell, but can be also be found close to the basal bodies, which originates the flagella. Also, the knockdown experiments showed that septins might participate to the cell division process, since transformed clones with the amiRNA showed a transient rod shape phenotype right after the cytokinesis followed by reduced levels of septin mRNA, which was not observed on the controls. These results strength the hypothesis that septins have different structural roles in *Chlamydomonas reinhardtii* that goes from the flagella assembling structure to the mitosis phase of the cell cycle.

**Keywords:** Septina. *Chlamydomonas reinhardtii*. Flagella.

### 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 WLOGA, D. et al. Septins stabilize mitochondria in *Tetrahymena thermophila*. **Eukaryotic Cell**, v. 7, n. 8, p. 1373-1386, 2008.
- 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.



## PG45

# Mechanism of the Phthalocyanines photochemical reactions depending on the substituent and geometry

COCCA, L. H. Z.<sup>1</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>; GOTARDO, F.<sup>1</sup>

leandro.cocca@usp.br

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

Research involving biological molecules has shown a large increase in last years due to the great variability of applications. Phthalocyanines and porphyrins molecules shown great interest in the linear and nonlinear optical area. It can be applied as photosensitizers in photodynamic therapy or in optical devices manufacturing, such as, optical limiters and solar cells, depending on their intrinsic characteristics. Based on these applications, here we present a nonlinear optical characterization study for different phthalocyanines molecules. The meaning of this work is to characterize some parameters of excited electronic states, such as excited state absorption cross-section and relaxation process, as a function of different peripheral structures as well as the central metallic ions. It is known that changes in the molecular structure can modify significantly the electronic energy levels and their characteristics, such as oscillator strength and lifetimes. A priori, the understanding of these parameters allows one to know about the real possibility of these types of materials be applied in a specific optical device. In order to perform the nonlinear spectroscopic characterization, we used the well-known Z-scan technique in three different configurations. For a single pulse (1) and pulse train Z-scan (2) techniques, a doubled frequency Nd:YAG laser Q-switched working at 532nm with a repetition rate of about 100 Hz was employed. This laser, in specific, delivers approximately 25 pulses of 100 ps of pulse width, separated by 13 ns from each other, denoted as pulse train. A Pockel cell was used to extract a single pulse from the train to be employed in the single pulse configuration. These setups allow us to determine, individually, the singlet excited state (single pulse) and triplet state absorption cross-section as well as the intersystem crossing time (pulse train) of the phthalocyanines derivatives. Besides these two Z-scan techniques, we used radiation pulses at 1 KHz with 120 fs pulse width at 1110 nm from an optical parametric amplifier pumped by a Ti:Sapphire laser with pulses of 150 fs at 775 nm and 0.8 mJ to generate a white light supercontinuum (about 450-750 nm). The supercontinuum pulses were employed to perform the white light Z-scan (3), which provides the entire singlet excited state absorption cross-section, with a better spectral resolution. Furthermore, relaxation times (radiative decay and internal conversion decay) and quantum yields (fluorescence, triplet state and internal conversion) were determined by modeling the population dynamics measured with the three experimental techniques. The calculated parameters shown that these phthalocyanines groups are good candidates to optical limiting, in addition, triplet state formation is favorable to possible application as photosensitizers in photodynamic therapy.

**Keywords:** Spectroscopy. Phthalocyanines. Z-Scan.

### Referências:

1 SHEIK-BAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam.. **IEEE**



**Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, 1990.

2 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. doi: 10.1063/1.123606.

3 COCCA, L. H. Z. et al. Mechanism of the Zn(II)Phthalocyanines photochemical reactions depending on the number of substituents and geometry. **Molecules**, v. 21, n. 5, p. 635, 2016. doi: 10.3390/molecules21050635.

## PG46

# Síntese e caracterização dos compostos $\text{SrTi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ , $\text{Cu/SrTiO}_3$ e $\text{Ni/SrTiO}_3$ aplicados à catálise da reação de deslocamento gás-água

COLETTA, V. C.<sup>1</sup>; MARCOS, F. C. F.<sup>2</sup>; NOGUEIRA, F. G. E.<sup>2</sup>; BERNARDI, M. I. B.<sup>1</sup>; ASSAF, E. M.<sup>3</sup>; GONÇALVES, R. V.<sup>1</sup>; MICHALOWICZ, A.<sup>4</sup>; MASTELARO, V. R.<sup>1</sup>

vitor.coletta@usp.br

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

<sup>2</sup>Departamento de Engenharia Química - UFSCar

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

<sup>4</sup>Institut de Chimie et des Matériaux de Paris Est - UPEC

A reação de deslocamento gás-água é uma das etapas da produção de  $\text{H}_2$  livre de  $\text{CO}$ , 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  $\text{SrTi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$ ,  $\text{Cu/SrTiO}_3$  e  $\text{Ni/SrTiO}_3$  com diferentes teores de cobre e níquel, visando aplicação como catalisadores para a reação de deslocamento gás-água. A síntese de  $\text{SrTi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_3$  foi realizada pelo método dos precursores poliméricos com calcinação em atmosfera de  $\text{N}_2$  seguida por um tratamento em  $\text{O}_2$  para remoção de carbono, possibilitando a obtenção de nanopartículas de grande área superficial em comparação ao método convencional. (3) O suporte das amostras de  $\text{Cu/SrTiO}_3$  e  $\text{Ni/SrTiO}_3$  foi sintetizado pelo método de sol-precipitação e a impregnação foi realizada por via úmida. As composições com melhor atividade catalítica foram  $\text{SrTi}_{0,80}\text{Cu}_{0,20}\text{O}_3$ , 10%  $\text{Cu/SrTiO}_3$  e 5%  $\text{Ni/SrTiO}_3$ , com 74, 93 e 100% de conversão de  $\text{CO}$  a  $350^\circ\text{C}$ , respectivamente. Foram realizados experimentos *in situ* de difração e de absorção de raios X para a determinação do estado de oxidação e da ordem local e de longo alcance em condições de reação. Para o entendimento da relação da atividade catalítica com o teor de cobre ou níquel, foram realizadas medidas de área metálica por quimissorção de  $\text{N}_2\text{O}$  e imagens de microscopia eletrônica com mapeamento por espectroscopia de raios X de energia dispersiva (EDX).

**Palavras-chave:** Catálise. Perovskitas. Hidrogênio.

### Referências:

1 LEVALLEY, T. L.; RICHARD, A. R.; FAN, M. The progress in water gas shift and steam reforming hydrogen production technologies: a review. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 39, n. 30, p. 16983-17000, 2014. doi: 10.1016/j.ijhydene.2014.08.041.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

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  $\text{SrTiO}_3$  nanoparticles. **Materials Chemistry and Physics**, v. 125, n. 1-2, p. 168-173, 2011. doi: 10.1016/j.matchemphys.2010.09.001.



## PG47

# Organic bioelectronics: from materials characterization to devices development

COLUCCI, R.<sup>1</sup>; FARIA, G. C.<sup>1</sup>

rcolucci@ifsc.usp.br

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

Organic electrochemical transistors (OECTs) based on conducting/semiconducting polymers have undergone significant progress in recent years and are poised to become the device of choice for fabricating electronic systems to interface with biology. Due to their ability to support both efficient ionic and electronic transport, OECTs are able to transduce biological signals, which typically involve ion flux, into electrical signals with high gain. (1) In a typical OECT, the active material is first processed into a thin film from solution, from vapor phase, or by electrochemical deposition, onto pre-patterned source and drain electrodes. The device is then placed in contact with an electrolyte solution containing a gate electrode. During operation, application of a gate voltage induces ion exchange between the polymer and the electrolyte, which is compensated by hole injection/extraction from the source and drain electrodes. This changes the doping state of the channel, leading to a change in the source-drain current. Because the electrolyte swells the polymer and allows ionic species to penetrate the bulk film, OECT devices typically exhibit an enhanced capacitance compared to field effect devices, and therefore display among the highest transconductance values in published literature. Additionally the source-drain current is highly dependent on the properties of the ionic circuit, making OECTs ideal sensors in physiological environments. Neural action potentials, blood filtration in the kidney and paracellular transport in epithelial tissues are a few among many important biological processes that involve transportation of key ionic species across physiological barriers such as cells and/or fluid lipid membranes. However, fundamental details on the transduction between ionic to electronic signals are not very well understood. (2) On the top of that, other general aspects such as geometry and device sensibility are yet to be explored. Therefore, this current PhD project focus on exploring and understanding fundamental aspects of the transduction as well as charge conduction and storage in OECTs. We are already developing a circuit modeling of the OECT device to better understand its working mechanism. Of specific interest to us here is to evaluate the kinetics of the doping/dedoping mechanism as well as to explore the impact of device geometry on the sensitivity of the OECT. These knowledges will be later applied to develop ultrasensitive biosensors and to propose guidelines for future device fabrication.

**Keywords:** OECT. Conducting/semiconducting polymers. Ionic transport.

### Referências:

- 1 KHODAGHOLY, D. et al. High transconductance organic electrochemical transistors. **Nature Communications**, v. 4, n. 2133, p. 1-6, 2013. doi: 10.1038/ncomms3133.
- 2 FARIA, G. C. et al. Organic electrochemical transistors as impedance biosensors. **MRS**





SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Communications**, v. 4, p. 189-194, 2014. doi: 10.1557/mrc.2014.35.



## PG48

# Desenvolvimento de imagens paralelas utilizando bobinas phased array e sample arrayed

CONSALTER, D.<sup>1</sup>; TANNUS, A.<sup>1</sup>; VIDOTO, E.<sup>1</sup>; PAPOTI, D.<sup>2</sup>; MARASSI, A.<sup>1</sup>

dmconsalter@usp.br

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

<sup>2</sup>Universidade Federal do ABC - UFABC

Aquisições paralelas e hardware dedicados tem sido desenvolvidos desde os anos 80 como um modo de reduzir o tempo de aquisição de Imageamento via Ressonancia magnética (IRM). Um dispositivo phased array (1) é um dispositivo com o conceito de receptor que utiliza múltiplas bobinas (canais) com seus circuitos próprios de detecção para adquirir sinais de RMN simultaneamente, seja para imagem ou espectroscopia. (2) Um exemplo de técnica de imageamento paralelo que utiliza bobinas do tipo phased array é a Sensitivity Encoding (SENSE). (3) Sample arrayed é o nome proposto neste trabalho para o método no qual cada canal da bobina multicanal é responsável pela aquisição independente do sinal da sua própria amostra, ou seja cada canal detecta uma amostra. Neste trabalho, descrevemos o desenvolvimento de uma bobina phased array de quatro canais para ratos usando placas de circuito impresso (PCI) flexível para operar em um sistema pré-clínico de 2T como modo de validar o método de construção de bobinas receptoras utilizando PCI flexível. Desenvolvemos também bobinas sample array de quatro canais para realizar imagens simultaneamente de quatro sementes, com um modo de validar o método proposta para melhor a qualidade da imagem, acelerar a análise via imagem e espectroscópicas de múltiplas sementes em estudos agrícolas.

**Palavras-chave:** Ressonância magnética nuclear. Imagens via ressonância magnética. RMN.

### Referências:

- 1 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.
- 2 HEIDEMANN, R. M. et al. A brief review of parallel magnetic resonance imaging. **European Radiology**, v. 13, n. 10, p. 2323-2337, 2003.
- 3 PRUESSMANN, K. P. et al. SENSE: sensitivity encoding for fast MRI. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 42, n. 5, p. 952-962, 1999.



## PG49

# Biosensors based on immobilized folic acid molecules for cancer cells detection

CORREIA, A. R.<sup>1</sup>; VIEIRA, N. C. S.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

abilenerc@ifsc.usp.br

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

The surface of many cancer cells over expresses folate receptors (FRs) which are glycoproteins that bind folic acid (or folate) with high affinity ( $K_d = 0.1$  to  $10$  nM) (1) and are important targets for the detection of cancer cells. (1) A number of biosensor platforms are promising for detecting and distinguishing between healthy and tumor cells in a simple and inexpensive way by using suitable receptors able to recognize FRs proteins. (2) This study is aimed at developing biosensors based on separative extended gate field-effect transistor (SEGFET) platforms modified with folic acid (3) for cancer cells detection. The biorecognition layer of the biosensors had been modified with layer-by-layer (LbL) films of poly(allylamine hydrochloride) (PAH) and folic acid (FA). LbL films containing up to 20 PAH/FA bilayers were assembled via the alternate immersion of glass substrates in the PAH and FA solutions ( $1$  mg/mL) for 3 min. The films had been characterized using UV-Vis absorbance, displaying a absorption band centered at 285 and 370 nm from FA. The interactions between PAH and FA had been investigated using FTIR. AFM analyses revealed a globular morphology for films containing 20 PAH/FA bilayers with a mean roughness of 17 nm. The films will be applied as SEGFET electrodes for detection of Hela cancer cells.

**Keywords:** Biosensors. Cancer cells. Folic acid.

### Referências:

- 1 CHEN, C. et al. Structural basis for molecular recognition of folic acid by folate receptors. **Nature**, v. 500, n. 7463, p. 486-489, 2013. 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 simplified measurement system. **Analytical Methods**, v. 6, n. 22, p. 8882-8885, 2014. doi: 10.1039/C4AY01803F.



## PG50

# Non-Markovian quantum dynamics induced by injection of classical colored noise

COSTA FILHO, J. I. da<sup>1</sup>; PINTO, D. de O. S.<sup>1</sup>

jose.inacio.filho@usp.br

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

One important aspect in the study of open quantum systems is the concept of non-Markovianity (1), which arises due to the back flow of information 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 resources, which are used to, for example, induce revivals of quantum channel capacity and speed up quantum evolutions. Also, non-Markovian effects naturally arise in the evolution of quantum systems interacting with structured environments, such as photonic band gap materials, quantum biological systems and solid state systems. Our project consists of injecting classical colored noise in a open quantum system (2), generating an effective non-markovian bath. The result is a system described by a lindblad-like master equation that allows possibly negative decay rates, which are a signature of non-markovianity. We apply a non-markovianity measure (3), related to these decay rates, to a specific system subject to this protocol, namely a qubit under amplitude damping, and show that the memory effects are present.

**Keywords:** Quantum information theory. Open quantum systems. Quantum non-Markovianity.

### Referências:

1 RIVAS, A.; 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.

2 BUDINI, A. A.. Quantum systems subject to the action of classical stochastic fields. **Physical Review A**, v. 64, n. 5, p. 052110, 2001. doi: 10.1103/PhysRevA.64.052110.

3 HALL, M. J. W. et al.. Canonical form of master equations and characterization of non-Markovianity. **Physical Review A**, v. 89, n. 4, p. 042120, 2014. doi: 10.1103/PhysRevA.89.042120.



## PG51

# Biossurfactantes produzidos por linhagens bacterianas isoladas de reservatório de petróleo: produção e avaliação das propriedades tensoativas

COSTA, G. C.<sup>1</sup>; BOSSOLAN, N. R. S.<sup>1</sup>

gabrielle\_cc@hotmail.com

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

Biossurfactantes são moléculas anfipáticas produzidas por uma grande variedade de microrganismos, que possuem atividade redutora de tensão superficial ou agem como agentes emulsificantes, ou apresentam ambas as propriedades. Possuem características superiores aos surfactantes sintéticos como: baixa toxicidade, biodegradabilidade e atividade específica em extremos de temperaturas, salinidade e pH. Um dos maiores mercados para biossurfactantes é a indústria petrolífera, onde são utilizados principalmente em processos de recuperação terciária do petróleo (MEOR). (1) O tipo, a qualidade e a quantidade de biossurfactante produzido são influenciados tanto pela fonte de carbono quanto pelas concentrações de nitrogênio, fósforo, manganês e ferro no meio, além das condições de cultivo, como pH, temperatura, salinidade e agitação. (2) O presente trabalho busca otimizar as condições de máxima produção de biossurfactante de três bactérias isoladas a partir de amostras de óleo e rocha de um reservatório *offshore* localizado no sudeste do Brasil, são elas: *Melghirimyces thermohalophilus*, *Bacillus subterraneus* e *Pseudomonas libanensis*. Estes microrganismos se mostraram adaptados às condições extremas presentes em reservatórios de petróleo e que se enquadram, deste modo, na classificação de termófilos e halófilos. Logo, os biossurfactantes produzidos por estes devem apresentar estabilidade em tais condições. Cultivos serão feitos utilizando-se um meio mineral, testando-se diferentes fontes de carbono (C), de nitrogênio (N), relação C/N, concentrações salinas e temperatura. Além do crescimento nestas condições, a produção de substâncias tensoativas será avaliada por meio do índice de emulsificação (E24) e da redução de tensão superficial utilizando-se um tensiômetro (procedimento duNouy com um anel de platina). (3) Estabelecidas estas condições, os biossurfactantes semi-purificados também serão testados quanto sua estabilidade em diferentes temperaturas, pH e salinidade, bem como sua atividade antimicrobiana, esta avaliada pelo método de microdiluição. Em uma próxima etapa do trabalho, serão testados substratos de baixo custo para a produção de biossurfactantes, uma vez que os substratos e os meios de cultivo são um fator economicamente limitante para a produção de biossurfactante em larga escala.

**Palavras-chave:** Petróleo. Biossurfactante. Bactérias termofílicas.

### Referências:

1 NITSCHKE, M.; PASTORE, G. M. Biossurfactantes: propriedades e aplicações. **Química Nova**, v. 25, n. 5, p. 772-776, 2002. doi: 10.1590/S0100-40422002000500013.

2 BANAT, I. M. Biosurfactants production and possible uses in microbial-enhanced oil recovery and oil pollution remediation: a review. **Bioresource Technology**, v. 51, n. 1, p. 1-12, 1995. doi:



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

10.1016/0960-8524(94)00101-6.

3 WALTER, V.; SYLDATK, C.; HAUSMANN, R. Screening concepts for the isolation of biosurfactant producing microorganisms. In: SEN, R (Ed). **Biosurfactants**. New York: Springer, 2010. p. 1-13



## PG52

# An open source software for MRI-based liver fat quantification

COSTA, Y. A.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>2</sup>; RODRIGUES, E. L. L.<sup>1</sup>

yuri.ajala@hotmail.com

<sup>1</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

The presence of fat in liver tissue, also known as hepatic steatosis, is a common pathogenic abnormality, found in up to 30% of the US population. This condition, when not related to alcohol abuse, is a strong indicator of insulin resistance and metabolic syndrome which may develop into nonalcoholic steatohepatitis (NASH), also known as nonalcoholic fatty liver disease (NAFLD), fibrosis, and cirrhosis. (1) Ultrasound scans are broadly accepted as sufficient for non-quantitative fatty liver diagnostic and case follow up. However, its operator dependency and limited accuracy for mild steatosis may mask results, bringing the need for specific, quantitative tests in situations including but not limited to, steatosis compounded by hepatitis C or evaluation of prospective liver donors and follow up of their recipients. These cases then usually rely on biopsy for quantification. This procedure, though, besides invasive, samples 1/50000 of the liver, increasing the chances of sampling error, as fatty tissue may not be uniformly distributed over the organ. Concerning noninvasive approaches for quantification of hepatic steatosis, magnetic resonance imaging (MRI) has shown great relation to histologic findings (2) making it a great candidates to replace invasive procedures. In addition, MRI scans can evaluate the liver as a whole within a single scan. Several MRI liver fat fraction (FF) calculation methods have been developed, most of them relying on voxel signal behavior over phase and time change. The processing of these signals, which can be done in a wide range of complexity, results in water and fat proton density (PD), the major molecular components to determine liver FF, thus called proton density fat fraction (PDFF). Three chosen calculation methods using standard gradient echo modulo imaging vary in complexity according to the amount of data available: Dixon two-point, Dixon adjusted for T2\* effects, requiring three echoes and Multi-interference, which requires a minimum of seven echoes for proper curve fitting. (3) The user is able to open a DICOM file, browse through the slices and echoes, and draw a region of interest (ROI) of their choice. The software then calculates the PDFF according to the number of points available. Alternatively, the software generates a pixel-by-pixel fat fraction map, graphically representing the PDFF. The algorithm will be evaluated against simulation models, MRI and biopsy data from 70 patients. Even though various PDFF calculation methods are constantly published in the scientific community, researchers and practitioners who want to adhere to this imaging quantification method must either develop their own software from scratch or, when available, purchase the proprietary software developed by their scanner manufacturer. The present research introduces the development and testing of an open source, free software for hepatic steatosis quantification and mapping, manufacturer and scanner independent, based on the most up-to-date findings on reliable PDFF calculation.

**Keywords:** Magnetic resonance imaging. Fatty liver. Fat quantification.



### Referências:

- 1 FARRELL, G. C.; LARTER, C. Z. Nonalcoholic fatty liver disease: from steatosis to cirrhosis. **Hepatology**, v. 43, n. S1, p. S99-S112, 2006. doi: 10.1002/hep.20973.
- 2 PERMUTT, Z. et al. Correlation between liver histology and novel magnetic resonance imaging in adult patients with non-alcoholic fatty liver disease - MRI accurately quantifies hepatic steatosis in NAFLD. **Alimentary Pharmacology and Therapeutics**, v. 36, n. 1, p. 22-29, 2012. doi: 10.1111/j.1365-2036.2012.05121.x.
- 3 YOKOO, T. et al. 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.





## PG53

# Nonlinear microscopy by elliptical polarization rotation

COURA, J. A. G.<sup>1</sup>; BARBANO, E. C.<sup>1</sup>; MIGUEZ, M. L.<sup>1</sup>; MISOGUTI, L.<sup>1</sup>

jorge\_coura@usp.br

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

Nonlinear optical processes (1) can be explored for microscopy and can delivery new type of image contrast, better spatial resolution, overcome the light diffraction limit, three-dimensional images, etc. It is a reach research field due to importance of for many applications in several areas. Each nonlinear effect can give different information of one sample region, and in this way, new nonlinear effects or techniques are well come and need to be tested. There are various nonlinear optical processes that can be used in microscopy, for example, second-harmonic generation, third-harmonic generation, two-photon absorption, fluorescence induced by two-photon absorption, etc. However, there are some that were never been used, like the nonlinear ellipse rotation (NER), mostly because of lack of one high sensitive and precise method for its measurement. Recently we developed a new simple, accurate and sensitive method for measuring NER, using a dual-phase lock-in amplifier at tightly focused beam condition. (2) This new method opens the possibility to explore the NER signal for nonlinear microscopy. In this work we have tested the proof of principle of a nonlinear microscopy based on NER signal. The measurements were done by using an amplified Ti:sapphire femtosecond laser system (150 fs, 1 kHz repetition rate, at 775 nm). We have obtained reliable NER images of glass capillary, glass beads, optical fibers and onion cells. By these results, it was possible to conclude the viability of using the NER measurements for microscopy.

**Keywords:** Nonlinear optics. Microscopy. Nonlinear ellipse rotation.

### Referências:

1 BOYD, R. W. **Nonlinear optics**. 3rd ed. Burlington: Academic Press, 2008. 613 p.

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



## PG54

# Técnicas de análise de caracterização aplicadas à hematitas

CRUZ, C. G. C.<sup>1</sup>; ANDRADE, M. B.<sup>1</sup>; GARCIA, G. S.<sup>1</sup>

cairocruz@ifsc.usp.br

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

Nesse trabalho foram utilizadas diferentes técnicas de caracterização para os três exemplares de hematita especular ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), provenientes da região de Itabira Minas-Gerais. A hematita ocorre em três tipos de rochas: metamórficas, sedimentares e ígneas. As amostras que foram analisadas dessa região são de origem metamórfica. As técnicas de caracterização foram: densidade; espectroscopia Raman; difração de raios X; cor do traço e microdureza. Na determinação da densidade, foram utilizados dois métodos que partem do princípio de Arquimedes. Vale resaltar quem ambos os resultados concordaram com a literatura que menciona valores entre 4,40 e 5,00  $\text{g}/\text{cm}^3$ . No primeiro método utilizando um béquer com água, a densidade encontrada, apresentou valores médios entre 4,38 $\text{g}/\text{cm}^3$  e 4,42 $\text{g}/\text{cm}^3$ . O segundo método realizado com o auxílio de uma balança analítica, apresentou valores entre 4,51 $\text{g}/\text{cm}^3$  e 4,97 $\text{g}/\text{cm}^3$ . Por meio da espectroscopia Raman foram identificadas as seguintes bandas no espectro característico: amostra 1: 226, 456, 292, 301, 411, 496, 612  $\text{cm}^{-1}$ ; amostra 2: 227, 246, 293, 410, 496, 611  $\text{cm}^{-1}$ ; e amostra 3: 225, 243, 293, 300, 410, 499, 611  $\text{cm}^{-1}$ . Os resultados obtidos concordam com os dados apresentados nas bases de dados da École normale supérieure de Lyon(1), e do projeto RRUFF da Universidade do Arizona (2). As amostras foram analisadas por difração de raios x de pó. Através dos difratogramas pudemos identificar as três amostras como sendo predominantemente hematita, foi utilizado a base de dados American Mineralogist Crystal Structure Database (3). A cor do traço característico da hematita foi obtida utilizando uma peça de porcelana com dureza maior do que a da espécie mineral, em torno de 9 a 10 Mohs. Com o friccionamento do minério na peça, se observou a deposição da hematita, que apresentou sua cor característica, marrom avermelhado. A técnica de microdureza ou dureza Knoop possibilitou a determinação da dureza média das amostras, entre 852,4 a 916,6  $\text{kg}/\text{mm}^2$ .

**Palavras-chave:** Hematita. Espectroscopia Raman. Difração de raios x.

### Referências:

- 1 FARIA, D. L. A.; SILVA, S. V.; OLIVEIRA, M. T. Raman microspectroscopy of some iron oxides and oxyhydroxides. **Journal of Raman Spectroscopy**, v. 28, n. 11, p. 873-878, 1997.
- 2 LAFUENTE, B. et al. The power of databases: the RRUFF project. In: ARMBRUSTER, T.; DANISI, R. M (Ed). **Highlights in mineralogical crystallography**. Berlin: De Gruyter, 2015. p. 1-29
- 3 DOWNS, R. T.; HALL-WALLACE, M. **The American mineralogist crystal structure database**. Disponível em: <[http://www.minsocam.org/MSA/amMin/TOC/Abstracts/2003\\_Abstracts/Jan03\\_Abstracts/Downs\\_p247\\_03.pdf](http://www.minsocam.org/MSA/amMin/TOC/Abstracts/2003_Abstracts/Jan03_Abstracts/Downs_p247_03.pdf)>. Acesso em: 29 ago. 2016.



## PG55

# Crescimento, estrutura e dinâmica molecular dos cristais do polímero poly(3-(ethylhexyl)thiophene) (P3EHT)

CUNHA, G. P.<sup>1</sup>; AZEVÊDO, E. R.<sup>1</sup>; FARIA, G. C.<sup>1</sup>; DUONG, D. T.<sup>2</sup>; SALLEO, A.<sup>2</sup>

giovanni.p@usp.br

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

<sup>2</sup>Stanford University

As propriedades funcionais de polímeros conjugados estão intimamente relacionadas as suas propriedades microscópicas, ou seja, a sua microestrutura. Deste modo, compreender o arranjo das cadeias poliméricas, sua dinâmica molecular e os processos de cristalização é de grande importância para a ciência dos polímeros e para a confecção de novos dispositivos. (1) Neste trabalho, empregamos ressonância magnética nuclear (RMN) e técnicas de raios-X para compreender os processos de dinâmica molecular e cristalização do polímero poly(3-(ethylhexyl)thiophene) (P3EHT). O P3EHT é um polímero modelo para tal estudo, uma vez que além de apresentar temperatura de fusão bem inferior a sua temperatura de degradação o mesmo ainda exibe tempo de cristalização a partir da fusão extremamente longo. Isto possibilita utilizar RMN *in situ* como sonda para detalhar o rearranjo molecular e dinâmica durante a cristalização. Utilizando RMN, caracterizamos a dinâmica molecular das cadeias poliméricas, observando um gradiente de mobilidade ao decorrer da cadeia lateral e rotações de pequenos ângulos para a cadeia principal. Estes resultados sugerem um aumento no volume livre entre cadeias consecutivas na fase cristalina, evidenciando que o grupo Etil na unidade repetitiva induz um rearranjo na molécula do P3EHT e impede que as cadeias poliméricas se empacotem eficientemente, como é normalmente encontrado para o comumente estudado poly(3-hexylthiophene) (P3HT). Tal *tilt* do anel tiofeno é consistente com resultados de experimentos de RMN empregando técnicas de *Double-Quantum*. Para o estudo da cristalização, por outro lado, empregamos técnicas de RMN no domínio do tempo (TD-RMN), difração de raios-X e absorção no UV-Vis. Estas técnicas nos permitiram extrair parâmetros úteis que controlam o processo de cristalização. Propomos ainda um modelo simples baseado nos princípios de Avrami para entender os fundamentos do processo. Finalmente, nossos resultados indicam ainda o ordenamento dos anéis tiofeno ( $\pi - \pi$  *stacking*) como o principal processo de cristalização para o P3EHT.

**Palavras-chave:** Ressonância magnética nuclear. Polímeros semicondutores. Cristalização.

### Referências:

1 ZHAO, K. et al. Entanglement of conjugated polymer chains influences molecular self-assembly and carrier transport. **Advanced Functional Materials**, v. 23, n. 48, p. 6024-6035, 2013. doi: 10.1002/adfm.201301007.



## PG56

# Formation of ultracold molecules using a high power fiber laser

DA SILVA, P. C. V.<sup>1</sup>; PASSAGEM, H. F.<sup>1</sup>; RODRÍGUEZ, R. C.<sup>1</sup>; MARCASSA, L. G.<sup>1</sup>

paulo.pc.vs@gmail.com

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

Ultracold molecules are continuously gaining space in the scientific community, due to its innumerable applications. (1) However, the production and manipulation of such molecules is in general restricted to large research groups, due to the complexity of the used methods. In our lab, we search for alternatives that require less equipment and simpler techniques. Motivated by our previous results (2), we are working on a novel technique that uses a single laser beam to produce, trap and manipulate ultracold molecules. Using a high power (50 W) single mode fiber amplifier, seeded by a tunable diode laser (around 1064 nm), we excite atomic pairs of  $^{85}\text{Rb}$  to bound levels of the  $0_u^+$  coupled electronic states, process which is called photoassociation (PA). The molecules then spontaneously decay to the ground electronic state  $1\Sigma_g^+$ . The same laser that performs the photoassociation has enough power to trap the molecules in a crossed optical dipole trap (ODT). The first evidences of the PA process were obtained by trap loss spectroscopy of an atomic magneto-optical trap (MOT), under influence of the high power PA laser. The dependence of the signal with the PA laser frequency suggest that atoms were being converted into molecules. Also lifetime measurements in an atomic ODT showed a faster populational decay when the laser was tuned in the PA frequency, which can be explained by molecular formation. (3) The final proof was observed via vibrational-selective ionization by a 20 Hz pulsed laser. A strong signal was measured in the molecular time-of-flight window, leaving no doubt about the molecular production. The dependency on the frequencies of both PA and ionization lasers were measured, showing the vibrational distribution and rotational splitting. Vibrational cooling of  $\text{Rb}_2$  was also performed, and now we are working to gather evidence for the trapping of molecules in the ODT, measuring molecular load and loss rates on the trap. For a near future, we also want to apply the same technique for  $\text{KRb}$  molecules, for which we already have an experimental setup. We believe that this molecular sample can be used to study cold collisions, which is also one of our future perspectives. To our knowledge, we are the first group to use a single beam for producing, trapping and manipulating molecules, and we hope that this technique will open new possibilities for atomic and molecular physics.

**Keywords:** Molecular physics. Photoassociation. Optical dipole trap.

### Referências:

1 DEMILLE, D. Diatomic molecules, a window onto fundamental physics. **Physics Today**, v. 68, n. 12, p. 34-40, 2015. doi: 10.1063/PT.3.3020.

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.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 PASSAGEM, H. F. **Fotoassociação de curto alcance em átomos de rubídio.** 2016. 80 p. Dissertação (Mestrado em Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.



## PG57

# Dinâmica de medidas quânticas e erros

DE CASTRO, L. A.<sup>1</sup>; NAPOLITANO, R. J.<sup>1</sup>

leoadec@gmail.com

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

O processamento de informação quântica requer medidas, muitas vezes precedidas de evoluções unitárias. Uma descrição realista de um computador quântico também deve levar em conta que o sistema interage com um ambiente externo – distinto do observador – que o remove de sua evolução ideal, gerando erros. Neste trabalho, fazemos um estudo da dinâmica de sistemas quânticos discretos e contínuos observados múltiplas vezes ou continuamente, enquanto interagem com ambientes externos. Para tanto, empregamos equações mestras de diferentes tipos, que permitem modelar os efeitos do observador e do ambiente, oferecendo-lhes características markovianas ou não. O estudo da dinâmica de uma medida contínua ruidosa revela que o sistema melhor preserva o seu estado inicial quando é realizada a medida de uma observável que não comuta com os operadores do ruído produzido pelo ambiente. Estes resultados, já conhecidos para o caso simples de um ambiente inicialmente num estado de vácuo e com o estado do sistema degenerado (1), são generalizados para uma temperatura inicialmente superior a zero e com o hamiltoniano de qubit não-nulo. (2) A universalidade destes fenômenos de preservação do estado inicial permite fazer analogia com o efeito Zenão quântico. Mantendo o mesmo formalismo, mas adaptando a interação com o ambiente para descrever um decaimento, verificamos em que situações ocorrem os efeitos Zenão e anti-Zenão quânticos. Paralelamente aos resultados obtidos para a dinâmica da medida, propomos, através da teoria dos valores fracos, um possível método experimental simples para o teste da validade dos modelos de descrição de medidas contínuas. (2) Finalmente, tratamos também de como tal conhecimento sobre a dinâmica da medida auxilia na elaboração de melhores formas de preservar a informação em códigos quânticos. (3) Com este estudo da dinâmica de uma medida quântica, esperamos elucidar questões de ordem prática no processamento de informação quântica, assim como ajudar no melhor entendimento de questões fundamentais, como o postulado da medida.

**Palavras-chave:** Informação quântica. Postulado da medida. Correção de erros.

### Referências:

1 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, n. 2, p. 022112-1-022112-16, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.022112.

2 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J. Efficient finite-time measurements under thermal regimes. **The European Physical Journal Plus**, v. 129, n. 10, p. 206-1-206-24, 2014. doi: 10.1140/epjp/i2014-14206-0.

3 DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. J. Error correction in short time steps during the application



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

of quantum gates. **Annals of Physics**, v. 367, p. 199-211, 2016. doi: 10.1016/j.aop.2016.01.014.



## PG58

# Crystallographic studies of ElrR, an *Enterococcus faecalis* transcriptional regulator, and DNA binding site interaction parameters

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

mdegroote@ursa.ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Institut National de la Recherche Agronomique - INRA

ElrR, a transcriptional regulator (TR) belonging to Rgg like family regulated by quorum sensor (QS)(1-2), that activates the expression of *elrA* operon, producing an *E. faecalis* virulence factor.(3) In this work we develop heterologous expression, purification, crystallization and structure determination of ElrR. Moreover, we confirmed the ElrR-DNA binding site on a particular DNA sequence and determined the kinetic binding constants. We use single anomalous diffraction (SAD) on selenomethionines to determine crystallographic phases, followed by molecular replacement in a higher resolution data set, using as a model the substructure determined on SAD data set. ElrR have the predicted, all alpha, fold for Rgg family of TR.(1) The HTH - DNA binding domain is located on N-terminus and shows tetratricopeptide like domain (TPR), related to protein/protein and protein/peptide interaction at C-terminus.(1) The TPR domain fold presents a right-handed superhelix, that on the concave surface presents the QS binding site. Using surface plasmon resonance we determined that ElrR binds to a specific DNA site, binding in two steps to the DNA, on the absence of the QS molecule, bringing the hypothesis that ElrR needs the QS to make a stable link with the DNA binding site.

**Keywords:** Quorum sensor. Rgg family. *Enterococcus 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. doi: 10.1128/IAI.00279-07.

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. doi: 10.1128/JB.00121-13.

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.





## PG59

# Avaliação da acurácia do modelo de carbono em solos- CQESTR- em sistemas agrícolas brasileiros

DEVAI MORAES, R. R.<sup>1</sup>; VILLAS BOAS, P. R.<sup>2</sup>

raphael.moraes@usp.br

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

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

O clima de nosso planeta tem sofrido alterações como, por exemplo, elevação das temperaturas médias globais e aumento do nível dos oceanos, principalmente devido ao efeito estufa causado pelo aumento da concentração do gás  $CO_2$ . (1) Assim é de extrema importância encontrar formas de diminuir a emissão ou de armazenar o carbono no solo através de manejos que aumentem a quantidade e o tempo de decomposição da matéria orgânica do solo. (2) No entanto, estudos com objetivo de determinar quais culturas e manejos aumentam a concentração de carbono são caros e demandam longo período de estudos. Uma solução para contornar esses empecilhos é utilizar métodos computacionais capazes de simular o comportamento da natureza, em específico do ciclo de carbono, decomposição da matéria orgânica e dinâmica dos solos e propor as culturas e manejos mais eficientes em sequestrar carbono, em tempo reduzido e com recursos muito menores. O modelo CQESTR (lê-se Cequester, do inglês sequestrador de C) foi adaptado por Y. Liang et al em 2009 (3) para aplicação em diferentes tipos de solo, climas e culturas dos EUA. O CQESTR simula a decomposição da matéria orgânica em três fases sendo a primeira uma fase de decomposição rápida, a segunda de decomposição lenta e a terceira de transferência e estabilização da matéria orgânica do solo (MOS). Nas duas primeiras etapas o modelo considera que a taxa de acúmulo de matéria orgânica é um decaimento exponencial, que depende da quantidade de resíduo na etapa anterior, uma constante universal, fatores de correção para condições não otimizadas, que variam de etapa para etapa, como umidade, taxa de nitrogênio no solo, tipo e drenagem do solo, e o tempo termal (CDD). Na etapa de transferência e estabilização o após 15.000 CDD soma-se todo o acumulado. Este estudo tem como fim compilar bases de dados de longo prazo de sítios brasileiros de forma a verificar sua acurácia em solos, climas, e sistemas de manejo utilizados no Brasil.

**Palavras-chave:** Sequestro de carbono. Modelagem de carbono. Matéria orgânica em solo.

### Referências:

1 FELDMAN, D. et al. Observational determination of surface radiative forcing by  $CO_2$  from 2000 to 2010. **Nature**, v. 519, n. 7543, p. 339-343, 2015. doi: 10.1038/nature14240.

2 LAL, R. Soil carbon sequestration impacts on global climate change and food security. **Science**, v. 304, n. 5677, p. 1623-1627, 2004. doi: 10.1126/science.1097396.

3 LIANG, Y. et al. Simulating soil organic matter with CQESTR (v. 2.0): model description and



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

validation against long-term experiments across North America. **Ecological Modelling**, v. 220, n. 4, p. 568-581, 2009. doi: 10.1016/j.ecolmodel.2008.11.012.



## PG60

# Salt development of a more soluble multi-component drug form: Ethionamide nitrate

DINIZ, L. F.<sup>1</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

luanfarinelli@ifsc.usp.br

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

Ethionamide (ETH) is a Biopharmaceutics Classification System (BCS) Class II drug with poor solubility in water. It is a second-line therapeutic agent manufactured as an oral dosage form to treat tuberculosis.(1) Recently, a series of organic salts and cocrystals with improved solubility were reported. (2) Although, the hydrochloride, hydrobromide and hexafluorosilicate salts of ETH are known, no additional inorganic forms have been reported to date. As a part of our study on designing of anti-tuberculosis solid forms with improved solubility, an Ethionamide nitrate salt namely ETHNO<sub>3</sub> was prepared. As a result of supramolecular synthesis, red plate crystals of ETHNO<sub>3</sub> were obtained and their structural characterization was carried out using spectroscopic, thermal, and single-crystal X-ray diffraction techniques.(3) ETHNO<sub>3</sub> has been prepared considering the protonable pyridine nitrogen atom of ETH and the possible resultant pyridinium...anion synthon. ETHNO<sub>3</sub> crystallizes in the Triclinic centrosymmetric P-1 space group with Z'= 4. In the structure, each independent ETH<sup>+</sup> molecule is H-bonded to a NO<sub>3</sub><sup>-</sup> anion by the pyridinium ring. The pyridine protonation could be confirmed by the proton location and also by the analysis of the C-N-C angle in the pyridine ring. The ETHNO<sub>3</sub> salt is a layered structure. In the crystal packing, the ETH<sup>+</sup> molecule and NO<sub>3</sub><sup>-</sup> anions are arranged defining different regions. The ionic pairs are connected each other by N1A-H1AB...O1D and N1B-H1BB...O1C H-bonds to form two independent chains along [011] direction. This arrangement results in the formation of hydrophobic and hydrophilic channels along the structure. From a pharmaceutical perspective, ETHNO<sub>3</sub> shows interesting properties for processing, storage and drug performance. Once the structure is thermally stable between 25 and 140 °C, as shown by DSC and TGA curves, and exhibit high solubility in water (almost 230 times more soluble than the reference ETH drug). In summary, the ETHNO<sub>3</sub>, presented here, has an interesting supramolecular assembly and due to high solubility in water is a great candidate to new anti-Tb drug.

**Keywords:** Ethionamide. Pharmaceutical salts. X-ray diffraction.

### Referências:

1 BROSSIER, F. et al. . Molecular investigation of resistance to the antituberculous drug Ethionamide in multidrug-resistant clinical isolates of Mycobacterium tuberculosis. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 55, n. 1, p. 355-360, 2011.

2 MELO, C. C. et al. Mechanochemistry applied to reformulation and scale-up production of Ethionamide: Salt selection and solubility enhancement. **European Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 81, p. 149-156, 2016. doi: 10.1016/j.ejps.2015.10.007.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 SHELDRIK, G. A short history of SHELX. **Acta Crystallographica A**, v. 64, n. 1, p. 112-122, 2008. doi: 10.1107/S0108767307043930.



## PG61

### Two-photon absorption spectrum of fluorenone-based molecules

DIPOLD, J.<sup>1</sup>; BATISTA, R. J. M. B.<sup>2</sup>; FONSECA, R. D.<sup>1</sup>; SILVA, D. L.<sup>3</sup>; SIMAS, A. M.<sup>2</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

jessica.dipold@gmail.com

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

<sup>2</sup>Departamento de Química Fundamental - UFPE

<sup>3</sup>Departamento de Ciências da Natureza, Matemática e Educação - UFScar

Two-photon absorption (2PA) is a widely studied process which has several applications, such as micro-fabrication, optical limiting and two-photon microscopy (2PM). The study of organic compounds with high two-photon absorption cross-sections is important for the development of these applications. Fluorenones are organic compounds with high two-photon absorption cross-sections and usually present low cytotoxicity, which can be used to stain particular organelles for 2PM applications. (1) However, there are still few fluorenone compounds with studied nonlinear optical properties. (2) We present the study of two-photon absorption of five different fluorenone-based molecules. The two-photon absorption cross-section spectra of the compounds were obtained through the open-aperture Z-Scan technique (3), and modeled by using a sum-over-states approach. Quantum-chemical calculations were made to support the interpretation of the experimental data. All composites presented maxima two-photon absorption cross-sections between 100 and 230 GM around 710 nm, which is within the expected range for the two-photon microscopy proposed application.

**Keywords:** Two-photon absorption. Non-linear optics. Fluorenone.

#### Referências:

1 DENK, W.; STRICKLER, J. H.; WEBB, W. W. Two-photon laser scanning fluorescence microscopy. **Science**, v. 248, n. 4951, p. 73-76, 1990.

2 CAPODILUPO, A. L. et al. Design and synthesis of fluorenone-based dyes: two-photon excited fluorescent probes for imaging of lysosomes and mitochondria in living cells. **Journal of Materials Chemistry B**, v. 3, n. 16, p. 3315-3323, 2015.

3 SHEIK-BAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, 1990.



## PG62

# Superradiant propagation of correlations in a cloud of two-level atoms

ESPIRITO SANTO, T. S.<sup>1</sup>; BACHELARD, R. P. M.<sup>1</sup>

tiagosantiago@usp.br

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

We investigate the propagation of light and the induced quantum correlations in a ultracold dilute atomic cloud. The atoms interact at long ranges between each other through real and virtual photons, leading to a "cooperative" scattering of light, where macroscopic degrees of freedom emerge. We are particularly interested in superradiance which manifests as an acceleration of the scattering rate of photons. Our system consists in a laser of classical light interacting with a dilute cloud of two level atoms. We compute the master equation (in Lindblad form) using "exact" simulations thanks to the python module QuTiP (1) and simulations of the truncated BBGKY hierarchy (2) which account for two-atom correlations. We analyze the propagation of quantum correlations in the cloud - monitoring the presence of superradiant effects. We also study the fluorescence spectrum, which also yields signatures of quantum coherences between the atomic dipoles (collective effects in the Mollow triplet (3)).

**Keywords:** Superradiance. Two level atoms. Quantum correlations.

### Referências:

1 JOHANSSON, J. R.; NATION, P. D.; NORI, F. QuTiP: an open-source Python framework for the dynamics of open quantum systems. **Computer Physics Communications**, v. 183, n. 8, p. 1760-1772, 2012. doi: 10.1016/j.cpc.2012.02.021.

2 PUCCI, L.; ROY, A.; KASTNER, M. Simulation of quantum spin dynamics by phase space sampling of Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon trajectories. **Physical Review B**, v. 93, n. 17, p. 174302-1-174302-10, 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.93.174302.

3 OTT, J. R. et al. Cooperative fluorescence from a strongly driven dilute cloud of atoms. **Physical Review A**, v. 87, n. 6, p. 061801-1-061801-5, 2013. doi: 10.1103/PhysRevA.87.061801.



## PG63

# Topological stability and textual differentiation in human interaction networks

FABBRI, R.<sup>1</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>

renato.fabbri@gmail.com

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

This work reports on stable (or invariant) properties and textual differentiation in human interaction networks, with benchmarks derived from public email lists. Activity along time and topology were observed in snapshots in a timeline, and at different scales. Our analysis shows that activity is practically the same for all networks across timescales ranging from seconds to months. The principal components of the participants in the topological metrics space remain practically unchanged as different sets of messages are considered. The activity of participants follows the expected scale-free outline, thus yielding the hub, intermediary and peripheral classes of vertices by comparison against the Erdős-Rényi model. (1) The relative sizes of these three sectors are essentially the same for all email lists and the same along time. Typically, 3-12% of the vertices are hubs, 15-45% are intermediary and 44-81% are peripheral vertices. Texts from each of such sectors are shown to be very different through Kolmogorov-Smirnov tests. These properties are consistent with the literature and may be general for human interaction networks, which has important implications for establishing a typology of participants based on quantitative criteria.

**Keywords:** Complex networks. Pattern recognition. Social network analysis.

### Referências:

1 JACKSON, M. O. **Social and economic networks: models and analysis**. Available from: <<https://class.coursera.org/networksonline-001>>. Accessible at: 31 Aug. 2016.



## PG64

# Threshold dose distribution and its causes and consequences in photodynamic therapy

FARIA, C. M. G.<sup>1</sup>; INADA, N. M.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

claramgf@ifsc.usp.br

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

Photodynamic therapy (PDT) consists in the photoactivation of a molecule producing reactive species of oxygen (ROS) in the targeted tissue. This principle was introduced around 1900 but further investigated as a candidate to cancer treatment in the decade of 1970. (1) Since then, there are several papers regarding the subject in vitro, in vivo and clinical trials and great advances were achieved. However, some challenges were not yet overcome, such as results variability. This project consists in the investigation of its causes using a threshold dose distribution model to evaluate cell resistance to PDT in vitro. It is known that different types of cells present distinguished resistance to treatment, which can be due to several factors: PS uptake, repair mechanisms, membrane permeability. The threshold distribution, obtained from the differentiation of the dose-response curve, was already employed in previous studies to improve the analysis of PDT results. (2-3) The main parameters of the distribution relate to the most frequent threshold in the population, given by the dose of the peak, and its variability, represented by the width of the distribution. To evaluate how the PDT response differs, we used normal and tumor cell lines from liver and breast tissues: HepaRG, HepG2, MCF-7 and HMEC. It was also performed a protocol of resistance induction the tumor cell lines to assess the variations in the threshold distributions of the derived cells. Results show that the normal cell lines generally present a more homogenous response since the threshold distributions are more symmetric and narrower than the ones from the tumor cell lines. In a comparison of the tumor cell lines, it is clear that MCF-7 is more resistant to PDT than HepG2. Experiments to investigate the causes for the different responses, such as photosensitizer uptake and ROS production, are in progress. The findings of this study are promising and encourage the further investigation of the variability in PDT responses using the threshold distribution model.

**Keywords:** Photodynamic therapy. Resistance. Cell.

### Referências:

- 1 ABRAHAMSE, H.; HAMBLIN, M. R. New photosensitizers for photodynamic therapy. **Biochemical Journal**, v. 473, n. 4, p. 347-364, 2016. doi: 10.1042/BJ20150942.
- 2 SABINO, L. G. et al. Experimental evidence and model explanation for cell population characteristics modification when applying sequential photodynamic therapy. **Laser Physics Letters**, v. 8, n. 3, p. 239-246, 2011. doi: 10.1002/lapl.201010119.
- 3 FARIA, C. M. G. et al. Determination of the threshold dose distribution in photodynamic action from in vitro experiments. **Journal of Photochemistry and Photobiology B**, v. 162, p. 168-175, 2016.





SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

doi: 10.1016/j.jphotobiol.2016.06.041.

## PG65

# Biossensor eletroquímico para análise de ácidos nucleicos do vírus da dengue

FARIA, H. A. M.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

henrique.fisica@ifsc.usp.br

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

O desenvolvimento de biossensores de ácidos nucleicos tem despertado grande interesse na última década (1) e dentre esses dispositivos, os biossensores eletroquímicos são os mais promissores.(2) Eles utilizam um pequeno fragmento-sonda de DNA ou RNA para identificar uma doença ou patógeno presente em uma amostra. Dentre as formas de detecção utilizadas nesses biossensores a detecção por medida direta do evento da hibridização (do inglês, label-free) é vantajosa, pois elimina as etapas de marcação e diminui o tempo da análise. (3) Entretanto, a análise de ácidos nucleicos em pequenos volumes da amostra continua sendo um desafio e pode facilitar o diagnóstico junto ao paciente. Este estudo tem como objetivo desenvolver biossensores mais eficientes e que operem com pequenos volumes da amostra. Foram fabricados eletrodos de trabalho na forma de tiras de teste utilizando como substrato o polietileno tereftalato metalizado com uma fina camada de ouro. Os resultados da caracterização por medidas de voltametria cíclica e espectroscopia de impedância eletroquímica, em uma célula eletroquímica, revelaram padrões muito próximos aos eletrodos de ouro do tipo bastão, comerciais. Um biossensor para detecção do vírus da dengue foi construído na nova plataforma. Sequências sintéticas de DNA de captura que identificam o sorotipo 1 foram imobilizadas no eletrodo e a detecção de sequências alvo complementares foi realizada por medidas de espectroscopia de impedância. O dispositivo exibiu um limite de detecção de  $(0,25 \pm 0,05)$  nmol.L<sup>-1</sup>, para uma faixa de concentração entre 1 a 100 nmol.L<sup>-1</sup>. Amostras contendo o sorotipo 2 não apresentaram reatividade com os eletrodos, comprovando a seletividade do biossensor. As tiras de teste fabricadas apresentaram constituição robusta e são adequadas para acoplamento com circuitos eletrônicos de processamento para criação de dispositivos biossensores diagnósticos para doenças infecciosas como a dengue.

**Palavras-chave:** Biossensor. Eletroquímica. Dengue.

### Referências:

- 1 NIEMZ, A.; FERGUSON, T. M.; BOYLE, D. S. . Point-of-care nucleic acid testing for infectious diseases. **Trends in Biotechnology**, v. 29, n. 5, p. 240, 2011.
- 2 JANEGITZ, B. C.; CANCINO, J.; ZUCOLOTTO, V.. Disposable biosensors for clinical diagnosis. **Journal of Nanoscience and Nanotechnology**, v. 14, n. 1, p. 378, 2014.
- 3 ROLIM, T.; CANCINO, J.; ZUCOLOTTO, V.. A nanostructured genosensor for the early diagnosis of systemic arterial hypertension. **Biomedical Microdevices**, v. 17, n. 3, p. 1, 2015.



## PG66

# A ratiometric luminescent thermometer based on thermally coupled states of rare-earth elements

FARIA, W. J. G. J.<sup>1</sup>; NUNES, L. A. O.<sup>1</sup>

walter.faria@usp.br

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

The vast majority of thermometers require direct contact with the body being measured for data collection, thus being ineffective for submicrometric applications. The development of nanotechnology in the last decades increased the interest in submicrometric scale thermal sensors. In the fields of biology and medicine, precise temperature sensing is of great importance. In recent years the design of thermometers that operate in such small scale has flourished (1), with luminescence being one of the leading techniques employed. Trivalent lanthanide (rare-earth) ions are of special interest for their weak coupling with the crystalline field, meaning that they suffer little influence of the structure in which they are introduced and therefore show narrow absorption and emission bands and longer lifetimes. These two features make them good candidates for a great number of applications, among which is thermometry. The trivalent europium ion ( $\text{Eu}^{3+}$ ) is an interesting choice for the development of a thermometer for biological applications. In these systems the temperatures of interest range from 288 to 323 K (15 to 50 °C) and radiation transparency starts around 600 nm. The  $\text{Eu}^{3+}$  ion presents closely spaced levels that are thermally coupled at room temperature, thus making it suitable for this purpose. In this study we employ the fluorescence intensity ratio (FIR) technique to achieve temperature determination. The procedure defines a thermometric parameter as the intensity ratio of a specific emission when the system is excited through two thermally coupled levels. As temperature varies, these levels' populations change and the emission intensities also change. In the case of the  $\text{Eu}^{3+}$  ion, the monitored emission represents the  $5D_0 \rightarrow 7F_4$  transition and the two excitation levels are the ground state  $7F_0$  ( $7F_0 \rightarrow 5D_0$  transition) and the upper  $7F_2$  state ( $7F_2 \rightarrow 5D_0$  transition). Since the Boltzmann distribution dictates the population of each state for a given temperature, we are able to infer such temperature from the emission intensities. Moreover, the intensity ratio enables us to predict the thermometers' calibration factor, as shown by Souza et al. (2)

**Keywords:** Luminescence. Thermally coupled states. Nanothermometry.

### Referências:

1 BRITES, C. D. S. et al. Thermometry at the nanoscale. **Nanoscale**, v. 4, n. 16, p. 4799-4829, 2012. doi: 10.1039/c2nr30663h.

2 SOUZA, A. S. Highly-sensitive  $\text{Eu}^{3+}$  ratiometric thermometers based on excited state absorption with predictable calibration. **Nanoscale**, v. 8, n. 9, p. 5327-5333, 2016. doi: 10.1039/c6nr00158k.



## PG67

# Estudos estruturais e biológicos da proteína MEG-27 de *S. mansoni*

FELIZATTI, A. P.<sup>1</sup>; ZERAIK, A. E.<sup>1</sup>; DEMARCO, R.<sup>1</sup>

anafelizatti@usp.br

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

A esquistossomose é uma das doenças tropicais negligenciadas com maiores índices de incidência e óbito, presente em mais de 70 países. No Brasil é causada pela espécie *S. mansoni*, cujo genoma foi publicado em 2009, permitindo a realização de estudos biomoleculares com o organismo, antes limitados por sua alta complexidade e difícil manipulação. Uma das importantes descobertas foi a classe de genes de micro-éxons (MEG), que são compostos por vários éxons pequenos e simétricos, sem similaridade intra ou extra espécie, com alta taxa de *splicing* alternativo e presença de peptídeo sinal que pressupõe a secreção dos produtos proteicos. Tais características levam para a hipótese que as proteínas codificadas por estes genes estão na interface parasito-hospedeiro, podendo estar relacionadas com funções vitais e mecanismos de escape perante o sistema imune.(1-2) Estudos publicados com MEGs corroboram para a hipótese. A proteína MEG-27 foi recentemente descrita juntamente com novas classe de MEGs presentes na região da cabeça e glândula do esôfago, órgão vital para a nutrição do parasita, onde ocorre a digestão de hemácias do hospedeiro.(3) Este projeto objetivou o estudo de algumas das MEGs recém descobertas, por meio de expressão heteróloga ou síntese dos peptídeos, e somente a MEG-27 apresentou sucesso em sua obtenção, na forma sintética. Predições mostraram que o peptídeo apresenta estrutura de alfa-hélice anfipática, confirmada pelo espectro de dicróismo circular. Apresenta-se instável em solução aquosa, com perfil agregado observado em DLS. Experimentos com micelas de surfactantes e vesículas de fosfolípidios de diferentes composições (SUVs) foram realizados via Dicróismo circular (CD), SRCD, Fluorescência Intrínseca e DLS resultando em perfis de interação com tais compostos. Estudos com células sanguíneas também foram realizados, mostrando que o peptídeo tem ação de hemoaglutinação a partir da concentração de 1µM em solução 1% de hemácia, característica também observada por microscopia. Foram construídas vesículas que mimetizam membranas de organismos (SUVs ou LUVs com calceína encapsulada) incluindo membrana de eritrócitos, onde pode-se observar novamente a ocorrência clara de interação entre o peptídeo em questão e modelos de membrana via estudos de *Leakage* e CD. Interessantemente, resultados de experimento de *Leakage* mostram que ocorre lise dos miméticos, o que não ocorre in vivo, o que pode indicar que a presença de compostos específicos da membrana biológica talvez impeça a lise, mas não o processo de hemoaglutinação. Foram realizados testes para busca de parceiros proteicos, por meio de Duplo-Híbrido e *Pulldown* com soro de camundongo, ambos sem resultados positivos. Também foi realizado experimento para certificar a localização da MEG-27, por *WISH*, mas apesar de algumas marcações pontuais observadas na glândula do esôfago, o baixo nível de expressão desse peptídeo torna o experimento de difícil reprodução, e, portanto, melhores métodos precisam ser experimentados. Os resultados obtidos até o momento corroboram para a hipótese que a MEG-27 possa interagir com membranas biológicas e outros estudos estão planejados para certificar essa hipótese: DSC, SPR, estudos com células humanas e de micro-organismos, CD orientado, teste com outras composições de miméticos de membranas, além de imunolocalização.



**Palavras-chave:** S.mansoni. MEG. Interação com membrana.

**Referências:**

1 BERRIMAN, M, et al. The genome of the blood fluke *Schistosoma mansoni*.. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 352-8, 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. 1112-21, 2010. doi: 10.1101/gr.100099.109.

3 WILSON, R.A. et al. The Schistosome esophagus is a 'Hotspot' for microexon and Lysosomal hydrolase gene expression: implications for blood processing.. **PLoS Neglected Tropical Diseases**, v. 9, n. 12, p. e0004272, 2015. doi: 10.1371/journal.pntd.0004272.



## PG68

# The tRNA<sup>Sec</sup> specific interaction of *Escherichia coli* Selenocysteine Elongation Factor (SelB) and Seryl-tRNA Synthetase (SerRS)

FERNANDES, A. F.<sup>1</sup>; SERRÃO, V. H. B.<sup>1</sup>; SCORTECCI, J. F.<sup>1</sup>; BASSO, L. G. M.<sup>2</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

adriano.fernandes@usp.br

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

<sup>2</sup>Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

Selenocysteine (Sec, U) is a non-canonical amino acid that represents the main biological form of selenium and its incorporation into selenoproteins occurs by in-phase UGA-encoded codon with a complex molecular machinery. (1) The *E. coli* specific Sec incorporation pathway begins with the L-adenylation of amino acid serine (L-Ser) by Seryl-tRNA Synthetase (SerRS), with ATP consumption, and further transfer to specific tRNA<sup>[Ser]Sec</sup>, resulting in Ser-tRNA<sup>[Ser]Sec</sup>. The Ser-tRNA<sup>[Ser]Sec</sup> is delivered to the Selenocysteine Synthase (Sela) for selenocysteil-tRNA<sup>Sec</sup> (Sec-tRNA<sup>Sec</sup>) synthesis. Then, Sec-tRNA<sup>Sec</sup> is delivered to the Selenocysteine Specific Elongation Factor (SelB) for incorporation into the nascent polypeptide chain in the ribosome. (1) This project aims the molecular characterization of the interactions of SelB and SerRS with different tRNA<sup>Sec</sup> mutants to understand their specificity and selectivity. Fluorescence Anisotropy Spectroscopy (FAS) assays show that SelB interacts with tRNA<sup>Sec</sup> in the presence of GTP with a dissociation constant of  $(266.8 \pm 27.5)$  nM while SerRS interacts with the same tRNA in rate of  $(56.4 \pm 8.1)$  nM in solution with excess of ATP. The biophysical characterization of the tRNA<sup>Sec</sup> was corroborated by Differential Scanning Calorimetry (DSC), Intrinsic Fluorescence Spectroscopy (IFS) and Analytical Ultracentrifugation (AUC). Furthermore, structural techniques such as Small Angle X-ray Scattering (SAXS) and Negative Stain Transmission Microscopy (NSEM) were employed to confirm the information previous obtained. The results of this project can improve the understanding of Sec incorporation into selenoproteins as well as elucidate the importance of tRNA structural elements for its specificity.

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

### Referências:

1 LEIBUNDGUT, M. et al . Selenocysteine tRNA-specific elongation factor SelB is a structural chimaera of elongation and initiation factors. **EMBO Journal**, v. 24, p. 11, 2005. doi: 10.1038/sj.emboj.7600505.



## PG69

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

FERREIRA, F.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>; RUGGIERO, C. A.<sup>1</sup>

felipe2.ferreira@usp.br

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

A tendência de crescimento do número de *cores* nos processadores é fruto da dogmática busca por desempenho presente na computação. (1) Com esta tendência a dificuldade de extrair todo o desempenho presente no processador também aumenta, pois não só é necessário sincronizar as operações e acessos à memória como também é necessário que a implementação escolhida seja uma implementação com paralelismo suficiente. É neste cenário que os modelos de execução a fluxo de dados voltam à tona, nestes modelos a sincronização é implícita e feita através da disponibilidade dos dados e, por causa dessa sincronização, é possível extrair todo o paralelismo ao executar, em paralelo, as operações cujos dados já estão disponíveis, mesmo em máquinas com muitos núcleos. (2) O modelo em desenvolvimento, diferente de outros modelos que usam as características de fluxo de dados, utiliza, explicitamente o conceito de fichas - cada ficha possui um conjunto de entradas e saídas, que são efetivamente os responsáveis pelo fluxo de dados, e uma função, de granularidade grossa, que será executada de acordo com a entrada - e tem como *motto* garantir a eficiência na execução mesmo em máquinas com muitos núcleos. Para analisar a eficiência do modelo, diversos algoritmos foram implementados, tanto no modelo em desenvolvimento como também em um modelo já consolidado (*OpenMP*). Todavia, como as máquinas de interesse são aquelas com grande número de núcleos, que atualmente não estão disponíveis no mercado, é necessário executar os testes em um simulador. (3) Os resultados preliminares, quando considerada a comparação entre os modelos testados, são positivos não só sob o aspecto da escalabilidade dos algoritmos implementados, como também nos tempos de execução dos mesmos.

**Palavras-chave:** Computação paralela. Fluxo de dados. Modelo de execução.

### Referências:

- 1 ZHRAN, M. Multicore processors: status quo and future directions. In: INTERNATIONAL COMPUTER ENGINEERING CONFERENCE, 10., 2014, Cairo. **Proceedings...** Piscataway: Institute of Electrical and Electronics Engineers - IEEE, 2015, p. 1-4. doi: 10.1109/ICENCO.2014.7050422.
- 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. In: ANNUAL INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTER ARCHITECTURE, 40., 2013, Tel-Aviv. **Proceedings...** New York: Association for Computing



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

Machinery - ACM, 2013, p. 475-486.





## PG70

# Complex networks computational modeling of visual attention

FERREIRA, S. J. V.<sup>1</sup>; COSTA, L. F.<sup>1</sup>

silviojvf@hotmail.com

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

Visual attention is a complex cognitive process whereupon individuals select the most relevant and informative stimuli to understand its environment, reducing information processing time and improving interaction skills. Computational modeling approaches to visual attention as filters propose that saliency maps are built from bottom-up visual features in the scene context, highly determining the attentional focus trajectory. Furthermore, these maps may be complemented by top-down cognitive aspects of information processing such as pattern recognition and visual task nature. Most of saliency maps are obtained through computer vision feature extraction, but there are not many studies modeling the attentional focus trajectory through complex networks. (1) In this study we modeled the attentional focus trajectory in complex networks derived from saliency maps. Salient regions in the scene correspond to nodes whose connections match attentional focus displacement possibilities. Connections were weighted both by bottom-up visual feature interactions and top-down pattern recognition and task demands. We will study how topological and dynamic measurement (2) from acquired complex networks can lead to prediction of attentional focus displacement and compare our approach with traditional saliency models.

**Keywords:** Visual attention. Saliency. Complex networks.

### Referências:

1 BORJI, A.; ITTI, L. State-of-the-art in visual attention modeling. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, v. 35, n. 1, p. 185-207, 2013.

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



## PG71

# Transcription initiation complex: mechanochemical characterization and preliminary structural study

FLOREZ ARIZA, A.<sup>1</sup>; GUERRA, D. G.<sup>1</sup>; PORTUGAL, R.<sup>2</sup>; CASSAGO, A.<sup>2</sup>

alfredo.florez.a@upch.pe

<sup>1</sup>Universidad Peruana Cayetano Heredia - UPCH

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Nanotecnologia - CNPEM

Every organism regulates the expression of its genes to survive in different environments. Transcription initiation is the first step in gene expression and probably the most important target of gene regulation in bacteria. The transcription machinery must recognize with exquisite specificity the sites where genes begin, the promoters, among a huge extension of non-specific binding sites offered by genomic DNA. These steps undertaken by the transcription initiation complex, involve movements of both the DNA and the protein that are associated to kinetic intermediates. (1) It was proposed the the DNA promotor is protected by the RNA polymerase, forming a wrapping around the enzyme, and this could be the first step before the DNA melting to form the open complex to start the gene transcription.(2) This works shows, firstly, some of our previous results in the mechano-chemical study of the Transcription Initiation complex, using Optical tweeters microscopy, here, we calculated the free energy change between the wrapped and unwrapped state of the transcription initiation complex. Also, we show the preliminary structural study of this complex, by a negatively stained dataset using transmission electron microscopy.

**Keywords:** RNA polymerase. Transcription initiation complex. Transmision electron microscopy.

### Referências:

1 MANGIAROTTI, L. et al. Sequence-dependent upstream DNA-RNA polymerase interactions in the open complex with  $\lambda$ PR and  $\lambda$ PRM promoters and mplications for the mechanism of promoter interference. **Journal of Molecular Biology**, v. 385, n. 3, p. 748-760, 2009. doi: 10.1016/j.jmb.2008.11.019.

2 DONISELLI, N. et al. New insights into the regulatory mechanisms of ppGpp and DksA on Escherichia coli RNA polymerase-promoter complex. **Nucleic Acids Research**, v. 43, n. 10, p. 5249-5262, 2015. doi: 10.1093/nar/gkv391.



## PG72

# Não linearidades de segundo e terceira ordem de sistemas moleculares ramificados

FONSECA, R. D.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

rubenfonseca@ursa.ifsc.usp.br

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

O interesse em estudar as propriedades ópticas em materiais orgânicos vem do fato que suas propriedades podem ser otimizadas através da engenharia molecular, além de apresentarem boa processabilidade e integralidade em dispositivos. Varias estratégias de design têm sido empregadas para sintetizar moléculas orgânicas, numa tentativa de favorecer as propriedades ópticas não lineares. Nos últimos anos moléculas multi-ramificadas estão sendo sintetizadas com o objetivo de melhorar estes efeitos não lineares, já que estas podem exibir um forte efeito cooperativo entre seus ramos. (1) Neste trabalho estudamos a relação entre a absorção de dois fótons (A2F) e a primeira hiperpolarizabilidade com a estrutura molecular de um conjunto de nove moléculas multi-ramificadas pertencentes aos grupos CN, 2CN, CNO<sub>2</sub> e CNS arranjados nas geometrias dipolar, quadrupolar e octopolar. O processo A2F foi observado empregando a técnica de Varredura-Z enquanto que a primeira hiperpolarizabilidade foi caracterizada por meio do uso da técnica de espelhamento hiper Rayleigh. Os dados experimentais para a absorção de dois fótons revelaram espectros bem definidos, com valores razoáveis de seção de choque no visível e infravermelho próximo. Além quando comparamos os valores da seção de choque por A2F das moléculas de diferentes geometrias com seu mesmo grupo, constatamos que existe um engrandecimento nas moléculas quadrupolares. Quando correlacionamos as moléculas com seus similares dos diferentes grupos, encontramos que o grupo que teve maior influencia foi o 2CN, seguido pelo grupo CNO<sub>2</sub> e o grupo CN foi o que menos influencia apresentou. Os resultados experimentais para a primeira hiperpolarizabilidade mostraram que a molécula quadrupolar (CN-2) apresentou um efeito maior na primeira hiperpolarizabilidade (4.6 vezes maior quando comparada com a dipolar de seu mesmo grupo) seguido pela molécula octopolar CN-3, na qual tem um efeito um pouco maior (1.6 vezes maior) que a molécula dipolar CN-1. Tudo isto nos leva a concluir que o acoplamento eletrônico entre os ramos contribuem fortemente para a seção de choque por A2F e primeira hiperpolarizabilidade nas moléculas quadrupolares, e no sendo relevante este acoplamento eletrônico entre os ramos nas moléculas octopolares. Finalmente, tudo estes resultados foram sustentado por meio de um estúdio teórico empregando a teoria do funcional da densidade (DFT).

**Palavras-chave:** Absorção de dois fótons. Primeira hiperpolarizabilidade. Moléculas multi-ramificadas

### Referências:

1 KATAN, C. et al. Effects of (multi) branching of dipolar chromophores on photophysical properties and two-photon absorption. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 109, n. 13, p. 3024-3037, 2005.



## PG73

# Interações de septinas de *Schistosoma mansoni* com modelos de membranas

FONTES, M. G.<sup>1</sup>; ZERAIK, A. E.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>

marina.fontes@usp.br

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

Septinas são proteínas que ligam GTP e estão envolvidas em uma variedade de funções celulares, nas quais se encontram associadas a membranas, como citocinese, exocitose e ciliogênese. (1) Estas proteínas já foram descritas em muitos organismos, sendo que o número de septinas em cada organismo varia de um (em algumas espécies de algas) a 13 (em humanos), sendo frequentemente associadas na forma de hetero-oligômeros. (1) Recentemente, descrevemos quatro septinas em *Schistosoma mansoni*, as quais se mostraram amplamente distribuídas ao longo do ciclo de vida do parasito, demonstrando a relevância destas proteínas em *S. mansoni*, além de consistirem um modelo de associação mais simples quando comparadas às septinas humanas. (2) A verificação inicial de que septinas de *S. mansoni* são capazes de se ligar a lipossomos nos possibilitou estabelecer um modelo que será utilizado para explorar os mecanismos de associação destas proteínas às membranas e os fatores que influenciam esta ligação. Serão abordadas questões atuais presentes na literatura, como o papel da ligação e hidrólise de GTP na interação de septinas com membranas, a influência da curvatura da membrana e do tipo de lipídeo no processo de ligação de septinas de *S. mansoni* às membranas, bem como a utilização de septinas de diferentes organismos para avaliar se a especificidade de septinas por determinado lipídeo é dependente do organismo. Desta forma, valendo-se da diversidade de septinas estudadas por nosso grupo, um estudo amplo de especificidade de septinas por lipídios, aliado à abordagem de questões relevantes presentes na literatura em um modelo mais simples, faz com que o complexo processo de associação de septinas às membranas possa ser mais bem compreendido.

**Palavras-chave:** Septinas. *Schistosoma mansoni*. Modelo de membranas.

### Referências:

1 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 13, n. 3, p. 183-194, 2012.

2 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.



## PG74

# A high throughput, inexpensive and open-source bioreactor for optimization of recombinant protein expression

STELMASTCHUK, L. B. F.<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

laure@usp.br

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

Automation allied to a miniaturized and high throughput format for protein production allows researchers to conduct high complexity experiments for screening expression conditions as it handles a number of different samples simultaneously. (1) For structural biology studies, establishing the conditions for obtaining large amounts of correctly folded protein is still a time consuming process. Although various methods are available nowadays, the equipment required for small volume-parallel processing of expression conditions is expensive and isolated to facilities where it must be operated by trained personal. In this context, the development of open-source hardware/software tools applied to biotechnology can improve research conditions at low-cost and with relatively uncomplicated approaches. This study will report an inexpensive customizable device for high throughput protein expression making use of 3D printing techniques and open- source software/hardware. The prototype developed will be capable of monitoring and adjusting bacterial culture conditions such as temperature, pH, oxigenation, and cell growth (A600) of a customized number of small volume samples. The programmed addition of reactants will be performed by the device, providing the user with an option to slightly change the original experiments setup. All the features will be controlled by an Arduino Mega board (Atmega2560 microcontroller), programmed and monitored using Arduino IDE. Structural components of the device will be modeled on CAD softwares and 3D printed using a RepRap cartesian 3D printer. (2) Assembling automated and customized devices using open-source software/hardware provides the opportunity of using high throughput methods even in small laboratories and, therefore, our findings can greatly facilitate the studies and reduce the costs of projects involving protein expression.

**Keywords:** Protein expression. High throughput. Open-source.

### Referências:

- 1 DUETZ, W. A.. Microtiter plates as mini-bioreactors: miniaturization of fermentation methods. **Trends in Microbiology**, v. 15, n. 10, p. 469-475, 2007. doi: 10.1016/j.tim.2007.09.004.
- 2 WITTBRODT, B. T. et al.. Life-cycle economic analysis of distributed manufacturing with open-source 3-D printers. **Mechatronics**, v. 23, n. 6, p. 713-726, 2013. doi: 10.1016/j.mechatronics.2013.06.002.



## PG75

# Influência dos aspectos físicos da superfície de tecidos biológicos no acoplamento da luz incidente

FORTUNATO, T. C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; MORIYAMA, L. T.<sup>1</sup>

thereza.fortunato@usp.br

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

Quando a luz incide sobre um tecido biológico, ela pode sofrer diferentes tipos de interação: reflexão, refração, espalhamento, transmissão e absorção. (1) A forma como a luz interage com um tecido biológico depende das características ópticas e estruturais do tecido. (2) Nas fototerapias e nos procedimentos de fotodiagnóstico, a dosimetria é geralmente feita com base em dados empíricos e experiências divulgadas em artigos científicos, pouco se faz para personalizar a dosimetria na prática clínica, embora seja sabido que a cor, hidratação e rugosidade da superfície do tecido possam influenciar na propagação da luz. (3) O trabalho proposto visa utilizar phantoms ópticos e tecidos biológicos para avaliar como a luz incidente em superfícies de diferentes características físicas (coloração, hidratação e rugosidade) interage com o meio de propagação, e investigar se meios como água, hidrogel e óleo podem ser utilizados para melhorar o acoplamento e conseqüentemente aumentar a quantidade de luz que penetra nos tecidos biológicos.

**Palavras-chave:** Dosimetria de luz . Óptica biomédica. Meio túrbido.

### Referências:

- 1 NIEMZ, M. H. **Laser-tissue interactions: fundamentals and applications**. Berlin: Springer, 2007. 305 p.
- 2 CHEONG, W. F.; PRAHL, S. A.; WELCH, A. J. A review of the optical properties of biological tissues. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 12, p. 2166-2185, 1990.
- 3 MANUSKIATTI, W.; SCHWINDT, D. A.; MAIBACH, H. I. Influence of age, anatomic site and race on skin roughness and scaliness. **Dermatology**, v. 196, n. 4, p. 401-407, 1998.



## PG76

# Condução de prótons em materiais cerâmicos à base de $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,82}O_{9-\delta}$

FRANCISCO, L. H.<sup>1</sup>; RODRIGUES, J. E. F. S.<sup>1</sup>; HERNANDES, A. C.<sup>1</sup>

lucas.francisco@usp.br

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

Os condutores iônicos sólidos são uma classe importante de materiais pelas suas variadas aplicações. Em especial, os condutores de prótons atraem o interesse da comunidade científica pelas suas aplicações em células a combustível (tecnologia estrategicamente importante para a diversificação da matriz energética mundial). (1) O objetivo deste trabalho é o estudo de propriedades de condução protônica em materiais óxidos policristalinos cerâmicos de estrutura perovskita complexa  $A_3B'B''O_9$ . (2) Experimentalmente, corpos cerâmicos de composição  $Ba_3Ca_{1,18}Nb_{1,82}O_{9-\delta}$  (BCN18) e variações dessa composição por dopagem com terras raras (Y, Nd, Sm, Gd), foram conformados a partir de pós obtidos via síntese por reação em estado sólido. A verificação das fases foi feita via observação das características de suas redes cristalinas por difração de raios-x. No estudo de propriedades elétricas de materiais cerâmicos, duas contribuições físicas distintas precisam ser consideradas: a do interior dos grãos, e a das interfaces entre grãos (contornos). Para separar esses efeitos foi utilizada a espectroscopia de impedância. Nessa técnica, as componentes real e imaginadas da impedância de um material são medidas e o espectro resultante é uma curva no plano complexo parametrizada pelas frequências aplicadas (tipicamente na faixa de 100mHz a 10MHz). A interpretação dos espectros é feita pelo modelo *Brick-Layer*, no qual a estrutura grão-contorno é representada por uma rede tridimensional cúbica de paralelepípedos monocristalinos. Aliada a estudos por microscopia eletrônica de varredura, que fornecem informações microestruturais, essa modelagem permite obter separadamente condutividade e permissividade elétrica para grãos e contornos. Espectros de impedância foram obtidos em diferentes temperaturas, para todas as composições químicas trabalhadas, para avaliar os efeitos térmicos sobre a condução. Em materiais condutores de prótons, é observado o acúmulo de defeitos nas regiões de contorno de grão, o que causa uma zona de depleção dos portadores de carga entre os grãos, aumentando a resistividade dos contornos. O estudo desse fenômeno é importante pois essa resistividade representa um desafio na aplicação desses materiais. (3) Utilizando um modelo de cargas espaciais é possível calcular a partir dos dados extraídos dos espectros de impedância resultados como o perfil de defeitos na região de depleção e a altura de sua barreira de potencial. O estudo dessas propriedades em função de diferentes composições e temperaturas de operação contribuem para um maior entendimento dos fenômenos de condução nesses materiais. Próximas etapas do projeto envolvem o estudo de características vibracionais do material, e sua relação com propriedades elétricas e estruturais.

**Palavras-chave:** Próton-condutividade. Espectroscopia de impedância. Carga espacial.

### Referências:

1 KLAUS, F. Solid state ionics: from Michael Faraday to green energy - the european dimension.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Science and Technology of Advanced Materials**, v. 14, n. 4, p. 043502, 2013. doi: 10.1088/1468-6996/14/4/043502.

2 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.

3 KJOLSETH, C. et al. Space-charge theory applied to the grain boundary impedance of proton conducting  $BaZr_{0.9}Y_{0.1}O_{3-\delta}$ . **Solid State Ionics**, v. 11, n. 5-7, p. 268-275, 2010. doi: 10.1016/j.ssi.2010.01.014.





## PG77

# Spatial dynamics of ecosystem engineers: a coupled map lattice approach

FRANCO, C.<sup>1</sup>; FONTANARI, J. F.<sup>1</sup>

caroline.franco@usp.br

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

Ecosystem engineering refers to the ability of certain organisms to actively modify their surrounding environment. This animals or plants cause physical changes in the environmental biotic or abiotic resources whereas seeking for better survival chances. In a ecological context, ecosystem engineers are keystone species that modify or create habitats via mechanical means (allogenic engineers) or using their own physical structures (autogenic engineers). (1) These modifications represent not only changes in the physical space which engineers share with other species, but also changes that may persist for extended periods, leading to evolutionary consequences. The theoretical study of such ecological phenomena is relatively recent when compared to the description of predator-prey systems, for instance; thus the current mathematical models are quite limited. The first model proposed to describe the population dynamics of ecosystem engineers was introduced by Gurney & Lawton in 1996. (2) Since then, few modifications appeared and even fewer models concerning the spatial aspect of the population dynamics where suggested. Here we focus on studying the impact of allogenic engineers, such as humans, beavers or earthworms through a new spatial dynamic model. Spatial dependence was introduced to Gurney & Lawtons original model by allowing the engineers to move through the regions of a limited domain. We use a coupled map lattice approach, where time and space are viewed as discrete variables. (3) The local stability analysis revealed the existence of stable, cyclic and chaotic regimes. The chaotic behavior of the system was evidenced with a period-doubling bifurcation cascade leading to non-periodic oscillating orbits and it was confirmed by the the numerical evaluation of the Lyapunov exponent. Performing synchronous simulations for the system dynamics, we observed the effect of different initial conditions, leading to a variety of spatiotemporal patterns. Finally, we emphasize the importance of understanding the effect of changing habitat resources in biotic communities as an essential mean to facilitate ecosystem restoration or counterbalance the consequences of anthropogenic action.

**Keywords:** Ecosystem engineering. Population dynamics. Coupled map lattice.

### Referências:

- 1 JONES C.G.; LAWTON J. H.; SHACHAK M. Organisms as ecosystem engineers. **Oikos**, v. 69, n. 3, p. 373-386, 1994.
- 2 GURNEY, W. S. C.; LAWTON, J. H. The population dynamics of ecosystem engineers. **Oikos**, v. 76, n. 2, p. 273-283, 1996.
- 3 COMINS, H. N.; HASSEL, M. P.; MAY, R. M. The spatial dynamics of host-parasitoid systems.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Journal of Animal Ecology**, v. 61, n. 3, p. 735-748, 1992.



## PG78

# Avaliação de propriedades do plasma para quantificação de carbono através da espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser

FRANCO, M. A. M.<sup>1</sup>; VILLAS BOAS, P. R.<sup>2</sup>

marco.franco@usp.br

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

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação - CNPDIA

O estudo da composição química dos solos é de fundamental importância para o agronegócio, já que o desenvolvimento sustentável da agricultura depende da correta manutenção de seus macro e micronutrientes, sendo que, em especial, o carbono desempenha papel fundamental no ciclo biogeoquímico das plantas. Entretanto, ainda não há técnicas ou equipamentos capazes de avaliar de forma ampla, rápida e eficaz a composição multielementar do solo. Assim, o grupo de Ótica e Fotônica da Embrapa Instrumentação tem trabalhado com a espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser (LIBS), que permite análises multi-elementares de substâncias nos estados sólido, líquido e gasoso em poucos segundos, não gera resíduos e pode ser aplicado diretamente em campo. Essa técnica utiliza pulsos de laser de alta energia como fonte de excitação, os quais são focados diretamente na superfície da amostra para gerar plasmas com temperaturas da ordem de  $10^4$  K no instante de sua ignição. (1) Após alguns microssegundos, devido ao esfriamento do plasma (temperaturas da ordem de  $10^3$  K), é possível identificar elementos químicos na amostra através da radiação emitida por eles. (1) Contudo, a técnica LIBS apresenta desvantagens devido à intensidade da radiação de fundo, causada por diversos fatores, como a alta temperatura do plasma, e aos efeitos de matriz (2), sendo que este problema é mais pronunciado em solos por conterem diversas espécies químicas que afetam a intensidade das linhas de emissão de carbono. Em um trabalho anterior (3) comparou-se o comportamento dos espectros LIBS a partir do tempo de atraso em sua aquisição, e mostrou-se que o tempo ótimo foi de  $1,5 \mu s$  que maximiza a correlação entre as linhas de emissão do espectro LIBS e a concentração de carbono nas amostras. Objetivando entender a relação entre parâmetros físicos do plasma e o tempo ótimo de aquisição para quantificação de carbono, este estudo avaliou a temperatura (T) e a densidade de elétrons ( $n_e$ ) dos plasmas LIBS obtidos em diferentes tempos de aquisição (entre 1 e  $3 \mu s$ ). Assim, as temperaturas obtidas através da equação de Boltzmann variaram entre 7448 K e 6305 K para 1 e  $3 \mu s$ , respectivamente, enquanto que as densidades de elétrons calculadas pelo alargamento Stark da linha de emissão de Hidrogênio (656,5 nm) variaram entre  $2,65 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  e  $4,45 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  para 1 e  $3 \mu s$ , respectivamente. No tempo ótimo, obteve-se  $T = 7192$  K com  $n_e = 2,23 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Isso indica que nos primeiros instantes de vida do plasma os processos colisionais foram preponderantes, de acordo com a alta densidade de elétrons e temperatura, e que a tempos mais longos processos de recombinação dominaram o plasma. Além disso, através da condição necessária de McWhirter, verificou-se que não houve equilíbrio termodinâmico local em tempos superiores ao tempo ótimo de  $1,5 \mu s$ . Concluiu-se, portanto, que em  $1,5 \mu s$  o plasma encontra-se em condições ótimas que maximizam a quantificação de carbono nas amostras.



**Palavras-chave:** Espectroscopia LIBS. Carbono. Plasma.

**Referências:**

1 CREMERS, D. A.; RADZIEMSKI, L. J.. **Laser-induced breakdown spectroscopy**. Los Alamos, USA: Wiley Online Library, 2006. 302 p.

2 JUDGE, E. et al. Theoretical and experimental investigation of matrix effects observed in emission spectra of binary mixtures of sodium and copper and magnesium and copper pressed powders. **Spectrochimica Acta Part B**, v. 122, p. 142-148, 2016. doi: 10.1016/j.sab.2016.06.004.

3 FRANCO, M. A. M. et al. Otimização do tempo de aquisição para quantificação de carbono total em solo usando LIBS. In: Workshop de Laser em Química Analítica, 2015, São Carlos. **Livro de resumos...** São Carlos: UFSCar; Embrapa Instrumentação, 2015, p. 16.



## PG79

# Van der Waals corrections applied to water and ethanol adsorption on noble and transition metal substrates

FREIRE, R. L. H.<sup>1</sup>; KIEJNA, A.<sup>2</sup>; DA SILVA, J. L. F.<sup>1</sup>

freire.rafaelheleno@gmail.com

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

<sup>2</sup>Institute of Experimental Physics - University of Wrocław

Despite of the large number of van der Waals (vdW) studies covering a wide range of developments, applications to molecules, solids and adsorption of molecules, in many cases the understanding about the role of van der Waals interactions still unclear. Also, a comparative study using different kind of approaches, showing their reliability for different systems, or correlating with transition metal surfaces, or molecules properties adsorbed on such surfaces are scarce. We employed a spin-polarized Density Functional Theory within van der Waals to study the performance of different van der Waals corrections, namely DFT-D2, -D3 and -D3(BJ), DFT-TS and -TS+SCS, as implemented in the Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP). The exchange-correlation functional proposed by Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) was used for all vdW corrections. Thus, we analyzed energetic, geometric and electronic properties of bulk (Cu, Pt and Au), clean surfaces (Cu(111), Pt(111) and Au(111)), Pt-monolayers Pt<sub>9</sub>/Cu<sub>9</sub>/Cu(111), Cu<sub>9</sub>/Pt<sub>9</sub>/Cu(111), Pt<sub>9</sub>/Au<sub>9</sub>/Au(111) and Au<sub>9</sub>/Pt<sub>9</sub>/Au(111)) and molecules (water and ethanol) adsorbed on these surfaces. For bulk systems, We found that, in general, the vdW addition provided a decrease in the equilibrium lattice constant, increasing the cohesive energy as pointed by Chiter *et al.*. (1) Furthermore, we analyzed different crystalline phase for these metals, found that for Au, the PBE+D2 fails to predict the experimental bulk phase, what so far was not pointed out in the literature. Even that, the deviation from experimental results of the equilibrium lattice constant for fcc structures were about  $\pm 1\%$ . The decrease in equilibrium lattice constant, provides a contraction to the substrates surface, which, in general, is a compressive strain. Such strain can shift the center of gravity of the occupied d states, and can affect the adsorption energy of molecules. By vdW, the substrates total energy decrease about 15-30 eV when compared with a standard PBE, showing the important role vdW for those systems. As showed previous, water and ethanol molecules have a similar behavior, they adsorb on transition metals substrates by O to the on-top site (2-3), which can shift a bit for vdW corrections, but keep close to it than other sites. The molecules adsorption energy had an expressive increase, about 3-4 $\times$ , due to vdW correction if compared with PBE. Sometimes, reaching about 1 eV, which are quite large for weak systems like water and ethanol adsorption. The smallest adsorption energies was observed for PBE+TS+SCS. After adsorption, we found a strong corrugation to the Pt<sub>9</sub>/Cu<sub>9</sub>/Cu(111) substrate for vdW corrections, which could indicates limitations of them. On the other hand, that corrugation can increase the number of low-coordinated sites and contribute to the molecules adsorption energy. Furthermore, the ethanol molecule adsorption showed distinct behavior depending on the ethanol isomer adsorbed, that is, a vertical arrangement was favorable for ethanol-gauche, while for ethanol-trans was tilted or almost flat arrangement. From those results, we hope to contribute with the knowledge about these approaches, as well as, a better understanding about the role of van der Waals interactions on the



systems presented here. (Supported by CAPES, CNPq and FAPESP)

**Keywords:** Density functional theory. Transition-metal. Van der Waals.

**Referências:**

1 CHITER, F. et al. Effect of van der Waals corrections on DT-computed metallic surface properties. **Materials Research Express**, v. 3, n. 4, p. 046501, 2016. doi: 10.1088/2053-1591/3/4/046501.

2 TERESHCHUK, P.; DA SILVA, J. L. F. Ethanol and water adsorption on close-packed 3d, 4d, and 5d transition-metal surfaces: a density functional theory investigation with van der Waals correction. **Journal of Physical Chemistry C**, v. 116, n. 46, p. 24695-24705, 2012. doi: 10.1021/jp308870d.

3 FREIRE, R. L. H.; KIEJNA, A.; DA SILVA, J. L. F. Adsorption of water and ethanol on noble and transition-metal substrates: a density functional investigation within van der Waals corrections. submitted to **Physical Chemistry Chemical Physics** (2016).



## PG80

# First and second global sound velocity of a Bose gas across the transition to Bose-Einstein condensation

FRITSCH, A. R.<sup>1</sup>; TAVARES, P. E. S.<sup>1</sup>; VIVANCO, F. A. J.<sup>1</sup>; TELLES, G. D.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; HENN, E. A. L.<sup>1</sup>

amilson.fis@gmail.com

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

We present an alternative approach for determining the sound velocity in Bose-Einstein condensates, based on thermodynamic global variables. (1) Using global variables, a volume parameter is defined to alternatively represent the physical volume of a trapped gas since the potential does not have rigid walls, and the usual volume can not be defined. Global variables were applied to determine the equation of state, the heat capacity, and the isothermal compressibility, and now we use them as a novel approach to determine the sound velocity. In our method, the total number of trapped atoms was carefully studied as a function of temperature across the phase transition, at constant volume. It allowed us to evaluate the first and second sound independently, resulting in values for the sound velocity in the classical and quantum regime, which are in good agreement with previous results found in the literature. (2-3) We also provide some insight on the dominant mode, either thermal or superfluid, on each sound velocity depending on the temperature range.

**Keywords:** Bose-Einstein condensate. Sound velocity. Superfluidity.

### Referências:

1 ROMERO-ROCHÍN, V.; BAGNATO, V. S. Thermodynamics of an ideal gas of bosons harmonically trapped: equation of state and susceptibilities. **Brazilian Journal of Physics**, v. 35, n. 3A, p. 607-613, 2005.

2 ANDREWS, M. R. et al. Propagation of sound in a Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, v. 79, n. 4, p. 553-556, 1997.

3 BOGOLIUBOV, N. On the theory of superfluidity. **Jornal of Physics**, v. 11, n. 1, p. 23-32, 1947.



## PG81

# Estudos computacionais da enzima N-Miristoiltransferase de *Plasmodium falciparum* e seus inibidores como candidatos a agentes antimaláricos

GARCIA, M. L.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

mariana.lopes.garcia@usp.br

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

A malária é uma doença infecciosa causada pelo parasita do gênero *Plasmodium* e transmitida pela picada da fêmea do mosquito *Anopheles spp.* A espécie *Plasmodium falciparum* é responsável pela forma mais letal de malária em humanos. (1) A enzima N-Miristoiltransferase (NMT, EC 2.3.1.97) foi investigada como candidata a alvo molecular no desenvolvimento de novos fármacos contra doenças parasitárias. Recentemente, a NMT foi confirmada como essencial e alvo quimicamente atrativo para o desenvolvimento de candidatos a fármacos antimaláricos. (2) O objetivo principal desse projeto é identificar os determinantes estruturais e moleculares responsáveis pela atividade inibitória de uma série de derivados benzotiofênicos como inibidores da NMT. Nesse sentido, os objetivos específicos incluem: estudos de Relação Quantitativa Estrutura-Atividade (QSAR, do inglês *Quantitative Structure-Activity Relationship*) 2D e 3D; modelagem por homologia da PfNMT; identificação das bases moleculares para o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos antimaláricos. Uma série de 39 compostos derivados de benzotiofeno como inibidores da NMT foi selecionado da literatura. (3) Estudos de QSAR 2D foram desenvolvidos utilizando o método de Holograma QSAR (HQSAR) que gerou modelos robustos e internamente consistentes ( $q^2 = 0,81$ ,  $r^2 = 0,95$ , para a PfNMT; e  $q^2 = 0,87$ ,  $r^2 = 0,95$  para a NMT humana). A etapa de validação externa dos modelos 2D mostrou elevada capacidade de predição de atividade biológica para novos derivados benzotiofênicos ( $r^2_{pred} = 0,81$  e  $0,67$ , para os modelos de PfNMT e NMT humana, respectivamente). Um modelo estrutural representativo da PfNMT foi construído a partir do método de modelagem por homologia, dado que essa estrutura não é experimentalmente elucidada. Além disso, ainda serão desenvolvidos modelos de QSAR 3D utilizando os métodos CoMFA (do inglês *Comparative Molecular Field Analysis*) e CoMSIA (do inglês *Comparative Molecular Similarity Index Analysis*) para a identificação de descritores 3D que auxiliem na melhor interpretação da relação estrutura atividade dessa série bem como no desenvolvimento de novos derivados mais potentes e seletivos para a enzima homóloga do parasita.

**Palavras-chave:** QSAR. Malária. N-Miristoiltransferase.

### Referências:

- 1 FLANNERY, E. L.; CHATTERJEE, A. K.; WINZELER, E. A. Antimalarial drug discovery: approaches and progress towards new medicines. **Nature Reviews Microbiology**, v. 11, n. 12, p. 849-862, 2013.
- 2 WRIGHT, M. H. et al. Validation of N-myristoyltransferase as an antimalarial drug target using an integrated chemical biology approach. **Nature Chemistry**, v. 6, n. 2, p. 112-121, 2014.





SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 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.



## PG82

# Spin-spin correlation functions of the random XX spin-1/2 chain

GETELINA, J. C.<sup>1</sup>; HOYOS, J. A.<sup>1</sup>

getelina@ursa.ifsc.usp.br

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

One can study disordered spin-1/2 chains via the method known as strong-disorder renormalization group (SDRG), which is believed to yield asymptotically exact results. Using this method one can, for instance, show that the average spin-spin correlation function decays with the square of the distance between spin pairs. One cannot determine though the proportionality constant for this power law via SDRG. Recent investigations, however, claim that there is a logarithmic correction to the scaling of the correlation function for the disordered Heisenberg spin-1/2 chain. (1-2) If this correction exists, the results from SDRG may not be asymptotically exact. Thus, to check the validity of such claim, we compute spin-spin correlation functions for the random XX spin-1/2 chain, which is a special case of the Heisenberg chain. We obtain the correlations via exact numerical diagonalization of the Hamiltonian. Mapping the XX chain into a free fermions model allows one to investigate considerably larger chains. Prior results show that the data becomes unreliable when the smallest (absolute) eigenvalue is of the same order of magnitude as the machine precision. This may occur while increasing the chain size or the disorder strength. We show that one can overcome such numerical instabilities by increasing the machine precision. Moreover, we compute the correlation between the so-called Fisher's spin pairs, which provides a better understanding of the system ground state.

**Keywords:** Correlation functions. Disordered systems. Spin chains.

### Referências:

1 SHU, Y.-R. et al. **Properties of the random-singlet phase: from the disordered Heisenberg chain to an amorphous valence-bond solid**. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1603.04362v1.pdf>>. Acesso em: 25 ago. 2016.

2 RISTIVOJEVIC, Z.; PETJOVIC, A.; GIAMARCHI, T. Exact asymptotic behavior of correlation functions for disordered spin-1/2 XXZ chains. **Nuclear Physics B**, v. 864, n. 2, p. 317, 2012.



## PG83

# Angular dependence of Rydberg interactions

GONÇALVES, L. F.<sup>1</sup>; MARCASSA, L. G.<sup>1</sup>

luisfelipe@ifsc.usp.br

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

Rydberg atoms are long living and possess strong and long-range interactions, this combination is an advantage on the study highly interacting atomic samples. Rydberg-Rydberg interactions are often described by electrostatic interactions which includes dipole-dipole and higher-order multiple terms. (1) Understanding the intrinsic aspects of the interaction potentials is of paramount importance, one reason being that the interactions enable Rydberg-atom-based quantum-computing schemes. Here we show a novel approach of the study of these interactions by proving directly the angular dependence of the multipole-interactions in atomic samples. Briefly, we trap Rb atoms in a tightly focused CO<sub>2</sub> optical dipole trap. This lead to a quasi-unidimensional sample of cold atoms. Once the atoms are trapped, the CO<sub>2</sub> light is turned off, and the atoms are simultaneously excited to a Rydberg state by a two photon resonant transition. The atoms are trapped and excited in a high-vacuum chamber that possess a sophisticated arrangement of 8 independent electrodes that allows the application of electric field in any orientation of interest. In the presence of an external field, atoms become polarized and as they are trapped in a quasi-unidimensional distribution, the atomic dipole moments can be described by a preferential angle related to the interatomic axis. Here we shall present results involving an experiments where we studied the  $nS + nS$  interactions by monitoring the saturation curves of excited Rydberg atoms as a function of ground state atoms density. Rydberg atom in  $nS$  states, possess only isotropic and repulsive van der Waals interactions, but in the presence of the field an angular dependence of the potential becomes present. This dependence is purely due to the induced dipole moment. We show that the density of Rydberg atoms can be controlled directly by the orientation of the field, and that at the magic angle ( 54) the electrostatic interaction is canceled at any electric field amplitudes.

**Keywords:** Rydberg atoms. Dipole-dipole interactions. Blockade radius.

### Referências:

1 SCHWETTMANN, A. et al. Cold Cs Rydberg-gas interactions. **Physical Review A**, v. 74, n. 2, p. 020701-1-020701-4, 2006.



## PG84

# Photophysical characterization of protoporphyrin IX molecule using linear and nonlinear optical spectroscopies

GOTARDO, F.<sup>1</sup>; COCCA, L. H. Z.<sup>1</sup>; DE BONI, L.<sup>1</sup>

fernando.gotardo@usp.br

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

Porphyrins molecules show great interest in the linear and nonlinear optical spectroscopy. It can be applied in photodynamic therapy and/or optical devices such as, optical limiters and solar cells, depending on their intrinsic characteristics. Here we present a study on Protoporphyrin IX (PP) molecules by means of electronic population dynamics spectroscopic characterization. Using experimental techniques of nonlinear optics, we were able to characterize the absorption of singlet and triplet states of PP dissolved in Dimethyl Sulfoxide. In order to perform this study, we employed two different lasers. One delivers train of pulses at 532 nm with individual pulses of about 100 ps width separated from each other by a 13 ns. The other one is a Ti:sapphire, which delivers 150 fs pulses in a repetition rate of 1 kHz. The latter is used to generate white-light continuum spectrum with will be employed on White-Light continuum Z-scan (WLZC) technique. This experimental setup allows obtaining the singlet excited state absorption for a wide wavelength range. The picoseconds laser is used in two different Z-scan techniques, a single (1) pulse and a pulse train techniques. Using the first one, we were able to determine the singlet states absorption cross-section in the picoseconds regime and compare with the results obtained with WLZC. Using the pulse train Z-Scan, we determined the triplet state parameters, such as, intersystem crossing rate (ISC) and triplet state absorption cross-section. (2) The PP showed that in the singlet and triplet excited state, reverse saturable absorption is the predominant effect at the visible region, which makes this molecule a good candidate for optical limiting on the picosecond and nanosecond regime. Furthermore, the ISC rate obtained characterizes the PP most likely to be applied in Photodynamic Therapy and solar cells. (3)

**Keywords:** Protoporphyrin. Z-scan. Nonlinear spectroscopies.

### Referências:

- 1 SHEIK-BAHAE, M. et al. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, n. 4, p. 760-769, 1990.
- 2 BONI, L. et al. Pulse train fluorescence technique for measuring triplet state dynamics. **Optics Express**, v. 19, n. 11, p. 10813-10823, 2011.
- 3 SENGE, M. O. et al. Nonlinear optical properties of porphyrins. **Advanced Materials**, v. 19, n. 19, p. 2737-2774, 2007.



## PG85

# Desenvolvimento e validação de um sistema de PCR em tempo real

GOVONE, A. B.<sup>1</sup>; CASTRO NETO, J. C.<sup>1</sup>

govone.angelo@gmail.com

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

As plataformas de PCR em tempo real (qPCR), desde seu primeiro relato de uso, tem sido utilizada em inúmeras aplicações em várias áreas, como por exemplo, biomédica, agropecuária e biotecnológica. Entretanto, o alto custo de aquisição das plataformas disponíveis, todas elas importadas, ainda é um fator impeditivo para a implementação da metodologia em muitos laboratórios e institutos de pesquisa. Por isso, o objetivo deste projeto é avaliar a viabilidade técnica e desenvolver e validar um sistema de qPCR. Espera-se que com essa plataforma, nacional, com especificidade e sensibilidade compatíveis e de menor custo que as plataformas importadas disponíveis no mercado, esta metodologia possa ser ainda mais difundida e utilizada nos mais diversos centros de pesquisa ou diagnóstico molecular. Para tal, pretende-se utilizar câmeras com filtros que barram o comprimento de onda de excitação da molécula fluorescente permitindo a passagem apenas da fluorescência. A excitação será feita através de sistema de iluminação LED com fonte regulada em corrente e chaveada. Sendo este responsável por emitir luz em comprimento específico, dependendo da absorção da molécula utilizada. Este espectro varia de acordo com o tipo de marcador utilizado no exame. (1) O trabalho encontra-se ainda em fase inicial, com o início do projeto do equipamento, que poderá tornar-se um produto patenteável.

**Palavras-chave:** PCR. Fluorescência. Tempo real.

### Referências:

1 LEE, M.-A. et al. Real-time fluorescence-based PCR for detection of malaria parasites. **Journal of Clinical Microbiology**, v. 40, n. 11, p. 4343-4345, 2002.



## PG86

### Estimativa da movimentação de dois peixes juntos no escuro

GUARIENTO, R. T.<sup>1</sup>; ALMEIDA, L. O. de<sup>1</sup>; STEFANI, I. H. Z. de<sup>1</sup>; GONÇALVES, M. R.<sup>1</sup>; ALVES, A. B.<sup>1</sup>; PINTO, R. D.<sup>1</sup>

rafael.tuma.guariento@gmail.com

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

Peixes elétricos pulsadores de campo fraco produzem sinais elétricos que se propagam pelo ambiente, sendo facilmente detectáveis de maneira não invasiva, e são utilizados pelo animal para realizar o mapeamento do ambiente em uma "imagem elétrica" (eletrolocalização) e para comunicar-se com coespecíficos para resolução de disputas territoriais, dominância, etc. (eletrocomunicação). (1) Desenvolvemos nos primeiros anos de doutorado uma ferramenta para detectar automaticamente a posição do peixe no aquário por meio de câmeras. Entretanto, esta espécie possui hábitos noturnos, o que torna interessante a realização de aquisições sem nenhum tipo de iluminação externa. Então, utilizamos uma metodologia para estimar a movimentação dos espécimes independente da filmagem. Esta análise pode ser realizada quando os peixes estão interagindo, e revelou relações entre o comportamento elétrico e motor associado ao papel de dominância. Para realizar a estimativa da movimentação de cada peixe, partimos do fato da amplitude captada em cada eletrodo variar conforme o posicionamento e orientação relativa do peixe com os eletrodos. Estimamos a movimentação, então, calculando o desvio padrão das amplitudes captadas nos eletrodos. No início da interação entre os espécimes, ambos animais apresentam grande movimentação. Após definida a relação de dominância, o peixe submisso se movimenta gradativamente menos, a ponto de ficar quase parado enquanto o dominante se move bastante.

**Palavras-chave:** *Gymnotus carapo*. Peixe elétrico. Estimativa da movimentação.

#### Referências:

1 MAX WESTBY, G. W. . Further analysis of the individual discharge characteristics predicting social dominance in the electric fish *Gymnotus carapo*. **Animal Behaviour**, v. 23, n. 2, p. 249, 1975. doi: 10.1016/0003-3472(75)90073-1.



## PG87

# Bound state in the continuum in a quantum wire

GUESSI, L. H.<sup>1</sup>; SERIDONIO, A. C.<sup>2</sup>; OLIVEIRA, L. N.<sup>1</sup>

lhguessi@gmail.com

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

<sup>2</sup>Departamento de Física e Química - UNESP Ilha Solteira

Bound States in the Continuum (BICs) are states whose wave functions are localized, even though they are immersed in a continuum. BICs were first theoretically predicted by von Neumann and Wigner, in 1929, who proposed a family of solutions to the Schrödinger equation characterized by destructive interference between partial wave functions at large distances from the potential core. (1) In condensed matter physics, the emergence of such states occurs due to the perfectly destructive interference between two resonances phase-shifted by  $\pi$ . As an example we highlight the theoretical prediction of BICs in graphene, for a pair of impurities adsorbed in a T-shaped geometry, in the center of the hexagonal cell. Two results should be emphasized: i) the emergence of BICs due to the Fano destructive interference assisted by the Coulomb interaction in the impurities in the framework of Hubbard I approximation, and ii) the absence of BICs if the adatoms are collinear with one of the carbon atoms. (2) Collinearity implies local coupling. In this work, we explore theoretically the emergence of BICs in a quantum wire (1D electron gas) with a pair of adatoms in the T-shaped geometry. Here, we study the interference between the local and non-local couplings of the two impurities to the wire. (3) In the Hubbard I approximation, we have recovered the BICs originally found in graphene. (2) By contrast, no BICs were found for purely local coupling. We now want to go beyond the Hubbard I approximation. To this end, we are studying the system with the Numerical Renormalization Group (NRG) method, which describe strong correlations essentially exactly. In particular, we will check whether the Kondo effect interferes with BIC formation. This is a preliminary study, since we are ultimately interested in the effect of strong correlations in the graphene adsorption problem.

**Keywords:** Bound state in the continuum (BICs). Fano interference. Quantum wire.

### Referências:

- 1 VON NEUMANN, J.; WIGNER, E. Uber merkwürdige diskrete Eigenwerte. **Physikalische Zeitschrift**, v. 30, p. 465 - 467, 1929.
- 2 GUESSI, L. H. et al. Catching the bound states in the continuum of a phantom atom in graphene. **Physical Review B**, v. 92, n. 4, p. 045409, 2015. doi: 10.1103/PhysRevB.92.045409.
- 3 SERIDONIO, A. C.; YOSHIDA, M.; OLIVEIRA, L. N. Thermal dependence of the zero-bias conductance through a nanostructure. **Europhysics Letters**, v. 86, n. 67006, p. 67006-p1 - 67006-p6, 2009. doi: 10.1209/0295-5075/86/67006.



## PG88

# Thermal expansion coefficient near the critically point in a BEC

GUTIERREZ, E. M.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

emmidv91@gmail.com

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

Ultra-cold atomic samples of Bose gases are a convenient system to study fundamental questions of modern physics, such as phase transitions and critical phenomena in BoseEinstein condensates (BEC). This work is devoted to investigation the thermodynamics susceptibilities, such as the isothermal compressibility and the thermal expansion coecient across of the transition of a 87Rb BEC. The critical phenomena and the critical exponents across the transition can explain the behavior of the isothermal compressibility and the thermal expansion coe cient near the critical temperature TC. By employing the developed formalism of global thermodynamics variables, we carry out statistical treatment of Bose gas in a 3D harmonic potential. After that, comparison of obtained results reveals the most appropriate state variables describing the system, namely volume and pressure parameter V and respectively. The both are related with the connement frequencies and BEC density distribution. We apply this approach to define the set of new thermodynamic variables of BEC, and also to construct the isobaric phase diagram V. Its allows us to extract the compressibility and the thermal expansion coefficient . The behavior of the isothermal compressibility corresponds to a second-order phase transition, while the thermal expansion coefficient around the critical point behaves as a law scale.(1) From this result we obtain the critical exponent 1.5, that allows us to determine the dimensionality of the system by means the scaling theory, relating the critical exponents with the dimensionality. As a result, we found out that the dimensionality of the system to be  $d= 3$  in agreement with the real dimension of the system.

**Keywords:** Thermal expansion coefficient . Critical point. Critical exponents.

### Referências:

1 DONNER, T. et al. Critical behavior of a trapped interacting Bose gas. **Science** , v. 315, n. 5818, p. 1556-1558, 2007. doi: 10.1126/science.1138807 .





## PG89

# Optical nonlinearities in microstructures produced by two-photon polymerization

HENRIQUE, F. R.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

francielerenata@usp.br

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

In recent years, the advent of integrated photonics led to the development of different photonic devices whose functionalities can be applied in a variety of fields, spanning from telecommunications to biology. The incorporation of polymeric microstructures to photonic devices is interesting because of their ease of functionalization with different compounds. This feature enables the introduction of different physical properties to the system. Furthermore, by means of the two-photon polymerization technique, polymeric microstructures can be produced with high resolution (1), contributing to the devices compatibility. In recent years, the study of linear optical properties of microstructures doped with different materials has received a great deal of attention.(2) However, studies regarding the polymeric microstructures nonlinear optical properties are still scarce because of the difficulty in applying the typical nonlinear characterization techniques to structures with such reduced dimensions. The objective of this project is to produce polymeric microstructures containing nonlinear organic compounds (such as azoaromatic compounds and perylenes) and investigate their nonlinear optical properties. The microstructures will be produced by two-photon polymerization and a Dispersive Scan (D-scan) (3) system will be built to allow the study of their nonlinear optical properties. In this technique the third order nonlinearity of a medium is determined through the spectral changes of a femtosecond pulse as it propagates along a sample, as a function of the dispersion introduced by a dispersive line. In this work we present preliminary results regarding the development of the D-scan system. The development of this project will allow the nonlinear characterization of nonlinear polymeric microstructures, allowing their further incorporation to on-chip devices.

**Keywords:** Polymeric microstructures. Optical nonlinearities. Dispersive Scan.

### 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.

2 MENDONÇA, C. R. et al. Three-dimensional fabrication of optically active microstructures containing an electroluminescent polymer. **Applied Physics Letters** , v. 95, n. 11, p. 113309, 2009.

3 LOURADOUR, F. et al. Dispersive-scan measurement of the fast component of the third-order nonlinearity of bulk materials and waveguides. **Optics Letters** , v. 24, n. 19, p. 1361-1363, 1999.



## PG90

# Caracterização de uma beta-xilosidase da família GH5 de *Thermogemmatispora* sp. T81

HIGASI, P.<sup>1</sup>; TOMAZINI, A.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

paulahigasi@yahoo.com.br

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

Dentre os compostos da biomassa a hemicelulose é o segundo mais abundante, despertando o interesse em seu estudo e utilização como fonte energética. Ao contrário da celulose, a hemicelulose é um substrato heterogêneo (1), mas assim como o primeiro, para sua depolimerização, são necessárias várias enzimas, que catalisam reações diferentes. (2) Entre estas enzimas está a beta-xilosidase, que através da clivagem de ligações beta-(1-4)-xilanopirosil, atua na liberação de resíduos de xilose, tendo portanto papel importante na liberação de açúcares necessários a fermentação destinada a produção de etanol. (3) O objetivo específico deste trabalho consistiu na caracterização bioquímica de uma hidrólise de glicosídeos (GH) pertencente a família 5, e proveniente da bactéria termofílica *Thermogemmatispora* sp. O gene codificado desta enzima foi expresso em *E. coli* e a enzima produzida de forma heteróloga. A partir da caracterização funcional da mesma, foram observadas as condições ótimas de atividade: pH 5 e 75 °C; foram detectadas atividades enzimáticas nos substratos xilano de faia e arabinoxilano de centeio, sendo que o primeiro foi o preferencial. As atividades catalíticas sobre estes dois substratos, em termos de liberação de açúcares (extremidades redutoras), se equipararam após 6 horas de atividade, possivelmente pela dificuldade de acesso da enzima ao arabinoxilano de centeio. Quanto a caracterização cinética, a enzima apresentou Km de valor  $3,30 \pm 0,18$  mg/ml e Vmax de  $0,07 \pm 1,20$  umol/min em xilano de faia, e na presença dos íons K<sup>+</sup> e Na<sup>+</sup>, teve atividade enzimática aumentada em 42% e 36%, respectivamente, em relação à atividade em nenhum aditivo. Em análise cromatográfica em alta pressão (Dionex), o único produto de hidrólise detectado (usando tanto xilano de faia quanto xilotriose como substratos) foi xilose, o que sugere que a enzima em questão é uma beta-xilosidase. A caracterização bioquímica mostrou que a enzima tem atividade nos substratos xilano de faia e arabinoxilano de centeio, e atua em altas temperaturas. O perfil de produtos de clivagem indicou que esta é a primeira caracterização de enzima de origem bacteriana com atividade de beta-xilosidase da família GH5, atividade esta que é de importância na completa degradação da hemicelulose, além de ter aplicação em outras indústrias biotecnológicas.

**Palavras-chave:** Beta-xilosidase. GH 5. *Thermogemmatispora* sp..

### Referências:

- 1 SAHA, B. C. Hemicellulose bioconversion. **Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology**, v. 30, n. 5, p. 279-291, 2003. doi: 10.1007/s10295-003-0049-x.
- 2 SHALLOM, D.; SHOHAM, Y. Microbial hemicellulases. **Current Opinion in Microbiology**, v. 6, n. 3, p. 219-228, 2003. doi: 10.1016/S1369-5274(03)00056-0.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 GÍRIO, F. M. et al. Hemicelluloses for fuel ethanol: a review. **Bioresource Technology**, v. 101, n. 13, p. 4775-4800, 2010. doi: 10.1016/j.biortech.2010.01.088.



## PG91

# Estudo inicial sobre o perfil motivacional de alunos de graduação em Física

HIROTA, L. C. B.<sup>1</sup>; ALMEIDA, N. S.<sup>1</sup>; PAIVA, M. L. M. F.<sup>1</sup>; MUNIZ, S. R.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>1</sup>

larissa.badan@usp.br

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

Atualmente, existe uma crescente procura pelos jovens estudantes às Universidades. Muito embora o ingresso às mesmas represente, na maioria dos casos, a realização de um sonho, o alto índice de evasão nos cursos, principalmente no primeiro ano, chama a atenção dos pesquisadores da área de ensino. Esse fato é ainda mais preocupante quando analisamos os cursos de exatas, que, na grande maioria dos casos, apresentam os maiores índices de evasão. Ainda não são conhecidos, plenamente, os motivos que fazem os alunos abandonarem os cursos que conquistaram, mas estudos apontam o processo motivacional como elemento essencial da aprendizagem e como fator decisivo acerca do desempenho escolar dos estudantes.(1). A esse respeito, afirma-se que existem diferenças qualitativas e quantitativas na motivação, o que significa dizer que existem padrões motivacionais mais ou menos funcionais para a aprendizagem.O presente trabalho busca avaliar o perfil motivacional de alunos de cursos relacionados a física ao longo da graduação, analisar o papel da atribuição de causalidade nesse processo e observar se existe alguma relação entre esses aspectos e o perfil socioeconômico e o desempenho acadêmico dos alunos. A avaliação do perfil motivacional dos alunos está sendo realizada através da aplicação da versão em português da Escala de Motivação Acadêmica (2), desenvolvida às luzes da Teoria da Autodeterminação.(3) Além disso, estão sendo aplicados questionários para avaliação das atribuições de causalidade para o sucesso e fracasso acadêmico e para levantamento do perfil socioeconômico e a média ponderada dos alunos está sendo utilizada na avaliação do desempenho acadêmico. O projeto prevê aplicações semestrais, ao longo de 2 anos, de questionários de avaliação. Dessa forma, esperamos mapear as mudanças nos perfis motivacionais desses alunos ao longo do curso. O presente estudo foi aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa com Seres Humanos e todos os participantes assinaram o termo de Consentimento Livre e Esclarecido. A primeira coleta de dados foi realizada nos meses de junho e julho de 2016 e participaram 267 estudantes. Destes, 88 são mulheres e 179 homens, sendo 76 estudantes do curso de Ciências Físicas e Biomoleculares, 42 do curso de Física Computacional, 99 do Bacharelado em Física e 49 de Licenciatura em Ciências Exatas. Nossa amostra é composta por alunos que ingressaram em seus respectivos cursos entres os anos de 2009 e 2016 com idade média de  $(22 \pm 5)$  anos(intervalo de 18 a 69 anos). Os questionários de motivação serão analisados utilizando análise fatorial exploratória. Serão, ainda, mapeadas as principais atribuições de causalidade para situações de sucesso e fracasso escolar visando compreender as percepções dominantes no que se refere ao lócus, à estabilidade e a controlabilidade por parte dos alunos dessas causas. Esses achados serão avaliados para verificar possível existência de correlação com os dados sócio econômicos dos respondentes e de seus respectivos desempenhos acadêmicos. Com isso, o presente estudo espera contribuir com o avanço das pesquisas sobre motivação em aprender dos estudantes do ensino superior, ampliando as pesquisas neste ramo, particularmente na área de ciências exatas.



**Palavras-chave:** Motivação para aprendizagem. Física. Ensino superior.

**Referências:**

1 BZUNECK, J. A . A motivação do aluno: aspectos introdutórios. In: BORUCHOVITCH, E.; BZUNECK, J. A (Ed.). **A motivação do aluno** : contribuições da psicologia contemporânea. Petrópolis: Vozes, 2009. p. 9-36

2 SOBRAL, D. T. Motivação do aprendiz de medicina: uso da escala de motivação acadêmica. **Psicologia: teoria e pesquisa**, v. 19, n. 1, p. 25-31, 2003.

3 RYAN, R. M.; DECI, E. L. Self-determination theory and the facilitation of intrinsic motivation, social development, and well-being. **American Psychologist**, v. 55, n. 1, p. 68-78, 2000.



## PG92

# Desenvolvimento de biossensores de baixo custo para detecção precoce de câncer

IBÁÑEZ, G.<sup>1</sup>; FATIBELLO FILHO, O.<sup>2</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>; GONÇALVES, D.<sup>1</sup>

gipi1908@gmail.com

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

<sup>2</sup>Departamento de Química - UFSCar

O conjunto dos diferentes tipos de câncer se encontra entre as principais causas de óbito a nível global. Em 2012, 8,2 milhões de pessoas no mundo morreram devido a esta doença e estima-se que para 2030 o número de mortes aumentará para 13 milhões por ano. (1) As probabilidades de sobrevivência ao câncer são afetadas por diferentes fatores, sendo a etapa na qual este é diagnosticado um dos mais decisivos. Por este motivo, é necessário o desenvolvimento de estratégias eficientes para o diagnóstico da doença em etapas iniciais. Os biossensores têm se tornado uma alternativa promissória para a detecção de câncer por apresentar vantagens como facilidade de operação e menor tempo de análises, em comparação com os métodos comumente utilizados. (2) Porém, diferentes fatores como especificidade e custos ainda precisam ser melhorados para obter dispositivos comerciais confiáveis. (3) Este projeto visa desenvolver biossensores eletroquímicos de baixo custo para diagnóstico de câncer. Os dispositivos serão construídos utilizando eléctrodos impressos em diferentes substratos flexíveis de baixo custo. Visando aperfeiçoar as propriedades analíticas dos dispositivos serão empregados diferentes nanomateriais na construção das plataformas sensoriais, com foco no uso do Carbon Black (negro de fumo). Este nanomaterial de baixíssimo custo e excelentes propriedades eletroquímicas ainda tem sido pouco explorado na construção de dispositivos para diagnóstico de doenças. Diferentes técnicas espectroscópicas e eletroquímicas serão utilizadas na caracterização das plataformas desenvolvidas e nos estudos da cinética de interação entre os analitos e as camadas bioativas.

**Palavras-chave:** Biomarcadores de câncer. Biossensores. Nanomateriais.

### Referências:

- 1 CANCER RESEARCH. Worldwide cancer statistics. Disponível em: <<http://www.cancerresearchuk.org/health-professional/cancer-statistics/worldwide-cancer>>. Acesso em: 21 nov 2015.
- 2 TOTHILL, I. E. Biosensors for cancer markers diagnosis . **Seminars in Cell and Developmental Biology**, v. 20, n. 1, p. 55-62, 2009. doi: 10.1016/j.semcdb.2009.01.015.
- 3 WANG, J. Electrochemical biosensors: towards point of care cancer diagnostics. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 21, n. 10, p. 1887-1892, 2006. doi: 10.1016/j.bios.2005.10.027.



## PG93

# Optimizing the action of photosensitizers by incorporating an antimicrobial peptide to *E. coli* lipid monolayers

JOCHELAVICIUS, K.<sup>1</sup>; NOBRE, T. M.<sup>1</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>; LORENZON, E. N.<sup>1</sup>

karen.jochelavicius@usp.br

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

Photosensitizers are molecules that can absorb energy from light and transfer it to oxygen. This process generates highly reactive singlet oxygen which initiates oxidative reactions in its neighborhood. In a cellular membrane, unsaturated phospholipids are potential targets for singlet oxygen, and this is the principle of the photodynamic therapy (PDT). It is applied to the treatment of tissues or microbial infection. Although the oxidative stress may disrupt the membrane and, therefore, cause cell death, the molecular mechanisms are not fully elucidated, and it is not yet established whether the peroxidation is the cause of death. (1) Here, we aim to investigate the adsorption and the interaction of methylene blue and curcumin in Langmuir monolayers of *Escherichia coli* total lipid extract. In a second stage, we intend to optimize the photo-oxidation by adding an antimicrobial peptide, aurein 1.2, to the monolayer. Such peptide exhibits its antimicrobial activity by destabilizing the bacterial membrane via a carpet-like mechanism. (2) Langmuir isotherms were performed for three different concentrations of photosensitizers (0.2  $\mu\text{mol/L}$ , 0.5  $\mu\text{mol/L}$  and 1  $\mu\text{mol/L}$ ), and four different waiting times (10 min, 30 min, 1 h and 2 h), to determine the ideal conditions. The measurements were conducted in the absence of light, and under irradiation of red or blue light. Blue LED was used to irradiate methylene blue, while red was used to irradiate curcumin. In addition to the isotherm, PM-IRRAS spectra will be collected. Results obtained at the first stage, proved interaction between the lipid film and the photosensitizers, in the absence of light. The presence of either methylene blue or curcumin increased the area occupied per molecule in the film, relatively to the area without photosensitizer. After 2 hours, natural oxidation of the lipids in the film was observed. Therefore, such a long waiting time is not suitable for our experiment. In conclusion, interaction between the photosensitizers and the *E. coli* total lipid extract monolayer occurs. Light irradiation is expected to modify the isotherm curves more visibly, and PM-IRRAS will provide us a better understanding of the interaction at the molecular-level.

**Keywords:** Photo-oxidation. Monolayers. Aurein 1.2.

### Referências:

- 1 RISKE, K. A. et al. Giant vesicles under oxidative stress induced by a membrane-Anchored photosensitizer. **Biophysical Journal**, v. 97, n. 5, p. 1362-1370, 2009. doi: 10.1016/j.bpj.2009.06.023.
- 2 AMBROGGIO, E. E. et al. Direct visualization of membrane leakage induced by the antibiotic peptides: maculatin, citropin, and aurein. **Biophysical Journal**, v. 89, n. 3, p. 1874-1881, 2005. doi: 10.1529/biophysj.105.066589.



## PG94

# A non-linear pattern recognition approach to extract patterns and pseudo-randomness

JUSTO, M. J. M.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

mj.machicao@gmail.com

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

Usually the terms patterns and randomness are studied separately as opposite fields. For instance, Classical pattern recognition involves extracting patterns from objects in order to systematically make predictions from them, while information theory and Cryptography explores randomness as an information measure. On the other hand, some researches explored both patterns and pseudo-randomness in a unified framework. (1-2) Since this integration would be in accordance to how many systems in nature show a slight fuzzy line between order and chaos. In this PhD project, we proposed a pattern recognition approach that aims for two purposes: (i) to extract patterns and (ii) to take advantages of the absence of patterns as a source of pseudo-randomness. This work has focused on different non-linear systems such as discrete dynamical systems, complex networks, cellular automata (CA), and their combinations. Thus, several methods were implemented aiming to extract patterns & pseudo-randomness from different dataset as entrances of the proposed method. During this PhD, we proposed two pattern recognition approaches applied to four applications of pattern recognition in multidisciplinary areas such as Cryptography, Biology and Information Science. The first method was to explore the patterns and pseudo-randomness from chaotic dynamical systems such as the logistic map, tent map and Hénon map. We observed that the patterns vanishes and therefore pseudo-randomness is increased by removing  $k$  right digits from the original orbit sequences. Therefore, we found an interesting chaotic source to obtain pseudo-randomness number generators (PRNGs). A second method was proposed which is based on the combination of cellular automata and networks, also called network automata (NA). The NA dynamic allows to extract patterns from different systems modeled as networks permitting their characterization. An interesting application of the NA approach was applied to the authorship recognition, thus literary texts have been modeled as networks, where words (nodes) are linked according to textual relationships. A third approach of pattern recognition was applied to plant metabolic networks, where the nodes are the metabolites connected to others metabolites through links formed by the reagent-product. In this scenario, several topological metrics from graph theory extracted phylogenetic patterns that converge trace of evolutionary information. So far, during this PhD, the proposed pattern recognition approach based on non-linear systems allowed us to explored patterns and pseudo-randomness extracted from a myriad of systems with successful results in terms of accuracy and pseudo-randomness metrics.

**Keywords:** Pattern recognition. Patterns and pseudo-randomness. Non-linear systems.

### Referências:

1 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.





SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

29, n. 1-3, p. 102-115, 2015.

2 MACHICAO, J. **Autômatos celulares caóticos aplicados na criptografia e criptoanálise.** 2013. 121 p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.



## PG95

# Discovery and development of a cosmetic active for skin oil control

KATEKAWA, E.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

katekawa@ifsc.usp.br

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

Sebum is a lubricating waterproofing material secreted in human and other mammals skin by sebaceous glands. Overproduction of sebum may lead to aesthetical problems, such as bright skin, and to medical conditions, such as acne and seborrhoea. The scarcity of safe, effective treatments for these conditions (1) as well as the social and economic impact related to them (2) prompts the discovery of new compounds as sebum-regulating agents for cosmetic purposes. Therefore, the main objective 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* - based on the homology modeling of a GPCR receptor, followed by a structure based virtual screening campaign - and *in vitro* studies using primary human sebocytes for the prospection of biologically active substances for skin oil control.

**Keywords:** GPCR. Homology modeling. Sebum.

### Referências:

1 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.

2 HAY, R. J. et al. The global burden of skin disease in 2010: an analysis of the prevalence and impact of skin conditions. **Journal of Investigative Dermatology**, v. 134, n. 6, p. 1527-1534, 2014. doi: 10.1038/jid.2013.446.



## PG96

### Estudo da técnica LIBS em solos

KRUGER, A. L.<sup>1</sup>; NICOLODELLI, G.<sup>2</sup>; MILORI, D. M. B. P.<sup>2</sup>

annelk1@gmail.com

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

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

A técnica LIBS, em inglês, Laser induced breakdown spectroscopy, tem sido amplamente estudada e aplicada para caracterizar diferentes tipos de materiais, sólidos, líquidos e gasosos. (1) O intuito de nossa pesquisa é utilizar esta técnica de grande potencial para a caracterização de solos, sendo esta linha de pesquisa muito ampla e de grande importância para a agricultura e a economia do país. Através desta técnica se obtém um espectro específico de cada amostra, com o qual se pode verificar a presença e a concentração de múltiplos elementos. A presença significativa dos elementos pode ser verificada qualitativamente apenas analisando o espectro, enquanto que a concentração só pode ser obtida quantitativamente após se obter uma curva de calibração entre a concentração obtida através de uma técnica de referência e alguma característica do pico de um elemento, por exemplo sua área ou intensidade. A partir desta curva de calibração é possível estimar a concentração do elemento para outras amostras de solo das mesmas regiões das quais foram retiradas as amostras para realizar a curva de calibração dos elementos de interesse. Para a realização das medidas é necessário ajustar os parâmetros envolvidos para se obter espectros de boa qualidade, como o comprimento de onda do laser, a densidade de energia, entre outros. Em seguida se faz necessária uma escolha adequada de um pico para análise, que não apresente efeitos significativos de interferência ou reabsorção e em alguns casos se faz necessário o tratamento do espectro com o intuito de minimizar os efeitos de matriz.(2) Para comparar o desempenho da técnica utilizando um laser de 532 nm ou de 1064 nm, serão utilizados um conjunto de 96 amostras de solo provenientes de duas regiões vizinhas, uma de mata e outra desmatada, ambas obtidas no interior do estado de São Paulo. Como resultado preliminar se obtiveram os espectros utilizando ambos os comprimentos de onda de laser e as concentrações de magnésio, ferro, manganês, potássio e cálcio para todas as amostras através da técnica de absorção atômica, que será utilizada como técnica de referência para as curvas de calibração que atualmente estão sendo construídas. Posteriormente, outras informações como temperatura e densidade de elétrons do plasma também serão investigados para caracterizar melhor o sistema.

**Palavras-chave:** LIBS. Espectroscopia. Solo.

#### Referências:

1 HAHN, D.; OMENETTO, N. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS), Part I: review of basic diagnostics and plasma-particles interaction: still-challenging issues within the analytical plasma community. **Applied Spectroscopy**, v. 64, n. 12, p. 335, 2010. doi: 10.1366/000370210793561691.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 HAHN, D.; OMENETTO, N. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS), Part II: review of instrumental and methodological approaches to material analysis and applications to different fields. **Applied Spectroscopy**, v. 66, n. 4, p. 348, 2012. doi: 10.1366/11-06574.



## PG97

# Uso de técnicas fotônicas como ferramenta ubíqua para a agricultura

KUBOTA, T. M. K.<sup>1</sup>; MAGALHÃES, A. B.<sup>2</sup>; VILLAS BOAS, P. R.<sup>2</sup>; MILORI, D. M. B. P.<sup>2</sup>

thiagomassaiti.k.k@gmail.com

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

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

Com uma grande diversidade climática, 13% de toda a água doce no mundo em seu território, abundância na energia solar e chuvas regulares, torna o Brasil um país favorável para a agropecuária. (1) Segundo o Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA), as vendas do setor de Agronegócio brasileiro, de janeiro até julho de 2016, alcançaram US\$ 52,8 bilhões, respondendo por 49% de todas as exportações do país. (2) Dois produtos que contribuem decisivamente para este sucesso são a soja e a laranja, onde o Brasil se enquadra como grande produtor e exportador. (2) Um fator que pode comprometer o crescimento do setor de agronegócio, são as pragas e doenças. Pensando nisso este trabalho vem para contribuir com os estudos desenvolvidos no Laboratório de Óptica e Fotônica, da Embrapa Instrumentação, em desenvolver equipamentos, capazes de realizarem diagnósticos de doenças, de forma rápida, precisa, sem gerar resíduos e de baixo custo. Desta forma foram utilizadas as técnicas de Espectroscopia de Fluorescência Induzida por Laser (LIFS) e Imagens de Fluorescência para criar classificadores que serviram para diagnosticar plantas doentes com Soja Louca II e *Huanglongbing* (HLB). O sistema LIFS é composto por um laser de diodo, que opera com comprimento de onda de 405 nm, um cabo óptico, espectrômetro, filtros e um computador para realizar a aquisição dos espectros. Já o sistema de imagem contém um laser de diodo, que trabalha com o comprimento de onda 377 nm, diferentes lentes, um filtro e uma câmera. Utilizando as informações das intensidades dos espectros do sistema LIFS, os histogramas de cores das imagens tirada com o sistema de Imagens de Fluorescência, foram escolhidos os descritores, que serviram de entrada para os modelos de classificadores. Foram utilizados modelos criados através de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLSR), onde as validações foram feitas através de validação cruzadas. Assim utilizando a técnica LIFS, foi possível alcançar um acerto de 88%, na diferenciação de folhas Sadias, HLB assintomática e HLB sintomática. E para a doença de soja foi obtido um acerto de 99%, na diferenciação de folhas com Soja Louca II de Sadias. Já utilizando o sistema de Imagens de Fluorescência, foi alcançado um acerto de 88,89% para a doença da laranja, e 100% de acerto para a doença da soja. Com isso mostramos que ambas as técnicas podem ser utilizadas como ferramentas para diagnosticar as doenças Soja Louca II e HLB, e pode auxiliar na escolha de um manejo correto para cada cultura, e assim ter uma maior chance de aumentar as produções.

**Palavras-chave:** Imagens de fluorescência. Espectroscopia. Doenças em plantas.

### Referências:

1 PORTAL DO AGRONEGÓCIO. **O que é?**. Disponível em: <<http://www.portaldoagronegocio>>.



com.br/pagina/o-que-e>. Acesso em: 2 maio 2016.

2 BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Exportações do agronegócio somam US\$ 52,8 bilhões no acumulado do ano. **Balança comercial**, 08 ago. 2016. Disponível em: <<http://www.agricultura.gov.br/comunicacao/noticias/2016/08/exportacoes-do-agronegocio-somam-uss-52-bilhoes-no-acumulado-do-ano>>. Acesso em: 9 ago. 2016.



## PG98

# Effects of Lorentz invariance violation in the UHECR spectrum

LANG, R. G.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

rodrigo.lang@usp.br

<sup>1</sup>Instituto 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. (1) Testing Lorentz invariance is, therefore, very relevant for theoretical physics. The effects of the violation are expected to be suppressed by the Planck scale and, therefore, should only be detectable at ultra-high energies, such as those of cosmic rays. While particle accelerators can reach energies about  $10^{17}eV$ , the Pierre Auger Observatory (2), the largest cosmic ray observatory, has detected events with energies above  $10^{20}eV$ . The astrophysical scenario is, thus, an important source for studying LIV. In this work we use a perturbative term in the free particle Lagrangian (3) which leads to a new term dependent on the energy in the dispersion relation. We then present the resulting modification in the cosmic rays propagation: a generic analytical calculation for the kinematics of any interaction with LIV is proposed, through which a new phase space is derived. These calculation are made explicitly for photopion production for protons, photodisintegration for nuclei and electromagnetic pair production for photons as those are dominant in these energies. We then obtain the ultra-high energy spectrum, analytically for protons and using Monte Carlo simulations for nuclei and compare with the data measured by the Pierre Auger Observatory in order to impose upper limits for the LIV terms and to study of astrophysical quantities such as the spectrum index and the maximum energy at the sources. The main effect observed in the kinematics is a reduction of the phase space, which reduces the energy losses of the cosmic rays. The spectrum is, therefore, recovered at the highest energies. Preliminaries results from the comparison with the Pierre Auger data for a spectrum of pure proton composition show that the best fit is obtained with a maximum energy at the sources lower than the energy for the photopion production. For nuclei both the composition and the spectrum are expected to be changed and for photons upper limits in the photon LIV term will be derived using the Pierre Auger upper limits for the photon flux.

**Keywords:** Cosmic rays. Lorentz invariance violation. Pierre Auger observatory.

### Referências:

1 MATTINGLY, D. Modern tests of Lorentz invariance. **Living Reviews in Relativity**, v. 8, p. 1-84, 2005. doi: 10.12942/lrr-2005-5.

2 PIERRE Auger Collaboration. The Pierre Auger cosmic ray observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 798, p. 172-213, 2015. doi: 10.1016/j.nima.2015.06.058.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 COLEMAN, S. R.; GLASHOW, S. L. High-energy tests of Lorentz invariance. **Physical Review D**, v. 59, n. 11, p. 116008-1-116008-14, 1999. doi: 10.1103/PhysRevD.59.116008.





## PG99

# Estudo de episódios históricos no ensino de ciências: Ole Roemer e a velocidade da luz

LAPORTE, R. S.<sup>1</sup>; SILVA, C. C.<sup>1</sup>

rafael.laporte@usp.br

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

Desde os gregos antigos, sempre existiram ideias controversas sobre a velocidade da luz e sua finitude. A questão foi amplamente debatida por diversos filósofos ao longo da história, como Euclides, Ptolomeu, Ibn Al-Haytham, René Descartes, Galileu Galilei, Giovanni Cassini e Christiaan Huygens. (1) 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, atribuindo o atraso ao tempo em que a luz levaria para percorrer a distância de Io a Terra. Atualmente a confirmação desta previsão é considerada como grande evidência experimental a favor da finitude da velocidade da luz. (1) Através do estudo deste episódio histórico, será elaborada uma atividade didática para alunos de ensino médio e graduação em física visando explorar o debate referente a finitude da velocidade da luz. A sequência didática incluirá uma contextualização histórica do episódio através do estudo de fontes primárias e secundárias, aplicação dos modelos de Descartes e Huygens para a luz na derivação das leis empíricas de reflexão e refração (2) e reprodução das observações de Ole Roemer através do uso de softwares que simulam o céu e de medições do horário de início dos eclipses de Io ao longo do ano realizadas em um observatório astronômico. Além da aquisição e fortalecimento do conhecimento teórico e histórico em física e astronomia, a sequência didática abordará aspectos importantes da natureza da ciência (3), como a relação entre o desenvolvimento teórico e o experimental de um fenômeno estudado, influência social e histórica no processo científico, processo de aceitação de um novo modelo teórico e as diversas reações de pensadores quando tem suas ideias confrontadas.

**Palavras-chave:** Velocidade da luz. Ole Roemer. Natureza da Ciência.

### Referências:

- 1 COHEN, I. B. **Roemer and the first determination of the velocity of the light**. New York: Burndy Library, 1944. 63 p.
- 2 SABRA, A. I. **Theories of light: from Descartes to Newton**. London: Oldbourne, 1967. 363 p.
- 3 SILVA, C. C.; MOURA, B. A. Science and society: the case of acceptance of newtonian optics in the eighteenth century. **Science and Education**, v. 21, n. 9, p. 1317-1335, 2012.



## PG100

### Estudo sinergismo arabinanase da família GH43: aumento na degradação celulolítica pela Accellerase.

LEITE, A. E. T.<sup>1</sup>; NASCIMENTO, A. S.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

anatognoli@hotmail.com

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

Atualmente a demanda de energia junto ao esgotamento das reservas de combustíveis fósseis e do aquecimento global tem despertado o interesse por novas fontes de energia renováveis. (1) Porém, o grande problema da produção desses biocombustíveis são os elevados preços dos dois processos envolvidos na formação dele (2), assim como a recalcitrância que esse material pode apresentar devido ao seu grau de cristalinidade. Coquetéis enzimáticos para a degradação da biomassa vegetal já são comercializados e estudos da adição de enzimas acessórias nestes coquetéis ainda estão em fase inicial de desenvolvimento. Neste trabalho, buscou-se avaliar a atividade sinérgica entre o coquetel enzimático comercial Accellerase e uma enzima arabinanase da família GH43 (ABN1). Com células de *E.coli* já transformadas, foi realizada a expressão e purificação dessa enzima. Foram analisadas diferentes condições para a possível identificação de sinergismo, incluindo a variação de tampão e pH e a realização de um pré-tratamento no substrato (papel-filtro) com a enzima ABN1 para uma posterior adição da Accellerase. Com relação aos tampões utilizados, nas condições de pH 5.0 e pH 8.0 avaliadas não foi observada ação sinérgica simultânea para uma reação de 16 horas. Com a realização de um pré-tratamento de 5 horas com a ABN1, em tampão fosfato pH 8.0, e em sequência uma reação com a Accellerase, em tampão citrato pH 5.0, foi possível observar que quanto maior o tempo dessa reação maior a quantidade de açúcar redutor era formado, indicando uma atividade sinérgica sequencial entre os dois componentes e que essa atividade é dependente do tempo. Foram realizadas reações de 1, 4, 16 e 20 horas, onde as que apresentaram atividade sinérgica foram a de 16 horas, com um aumento de 8%, e a de 20 horas, com aumento de 20% na formação de produto. Devido ao aspecto apresentado pelo papel filtro após o pré-tratamento foi analisada a formação de açúcares redutores nessa etapa. Como não foi detectada a formação destes açúcares, é possível que a causa desse sinergismo seja uma alteração estrutural ou morfológica no papel filtro. Para analisar esta hipótese serão realizadas medidas de ressonância magnética nuclear (RMN) e de microscopia eletrônica de varredura (MEV). Os resultados já obtidos indicam que é possível melhorar a degradação da celulose pelo coquetel enzimático Accellerase através da adição de uma enzima acessória, sem atividade celulolítica, tornando assim mais acessível a produção e utilização de combustíveis de segunda geração.

**Palavras-chave:** Sinergismo. Arabinanase. Accellerase.

#### Referências:

1 PANWAR, N. I.; KAUSHIK, S.C.; KOTHARI, S. Role of renewable energy sources in environmental protection: a review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 15, n. 3, p. 513-1524, 2011. doi: 10.1016/j.rser.2010.11.037.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 DIMAROGONA, M.; TOPAKAS, E.; CHRISTAKOPOULOS, P. Cellulose degradation by oxidative enzymes. **Computational and Structural Biotechnology Journal**, v. 2, n. 3, p. 1-8, 2012. doi: 10.5936/csbj.201209015.



## PG101

# Protoporphyrin IX silica-based nanostructure for breast cancer and melanoma treatment

LEITE, I. S.<sup>1</sup>; VIVERO-ESCOTO, J. L.<sup>2</sup>; LYLES, Z.<sup>2</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; INADA, N. M.<sup>1</sup>

ilaiali.leite@gmail.com

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

<sup>2</sup>Department of Chemistry - University of North Carolina at Charlotte

According to the World Health Organization, cancer - a collection of over 100 related diseases - is among the leading causes of mortality worldwide, with 8.2 million cancer-related deaths reported in 2012. (1) The efficiency of conventional treatments is hindered by several factors including side effects, resistance and metastasis. Therefore, either new approaches are required to treat this group of diseases or current treatments need to be optimized. Photodynamic therapy (PDT) is a technique originally developed for cancer treatment, but currently it is also used to treat infections and other diseases. (2) PDT efficiency depends on the photosensitizer buildup at the treatment site, and the challenge of delivering the active substance also constitutes a fundamental problem in drug development. Nanotechnology has been employed since the 1960's to optimize drug delivery through the use of different systems. The combination of PDT's oxidative damage to induce cell death with nanotechnology's targeting ability and the enhanced permeation through cell membrane are interesting features to optimize cancer treatment. In the present work, we are reporting the efficiency of two stimuli-responsive silica nanoparticle platforms chemically functionalized with protoporphyrin IX (PpIX) in tumor (breast carcinoma and melanoma) and healthy cells (keratinocytes and dermal fibroblasts), *in vitro*. The nanoparticles displayed higher phototoxicity for the MCF-7 (breast cancer), which yielded viability values under 30 %, than the HaCaT (keratinocytes) cells, where the overall viability was approximately 70 %. The use of the corresponding amount of free PpIX that was contained in the nanoparticles' concentrations, however, resulted in a high phototoxicity for both MCF-7 and HaCaT cells (<10 % viability), showing the free photosensitizer's lack of selectivity toward tumor cells. Assays evaluating the response of murine melanoma cell line B16F10 and the healthy human dermal fibroblast (neonatal) cell line HDFn also display the higher susceptibility of tumor cells to the silica-based nanoparticles: concentrations above 75  $\mu\text{g}/\text{mL}$  were able to eradicate 90 % of the melanoma cells, while the same effect was observed in fibroblast cells when 225  $\mu\text{g}/\text{mL}$  solutions were used. It is hypothesized that after internalization by cancer cells, due to its reducing environment, the PpIX is released in its monomeric form, decreasing the aggregation of this molecule, avoiding self-quenching. (3) Further studies included in this project are: synthesis and characterization of a PpIX polymer-based nanoparticle; the determination of the nanostructure's mechanism that lead to cell death (reactive oxygen species, intracellular calcium, mitochondrial membrane potential, apoptosis and necrosis) by confocal laser scanning microscopy and flow cytometry; the determination of the selected nanoparticles' viability to treat tumors in an orthotopic xenograft mouse model (melanoma and non-melanoma skin cancer).

**Keywords:** Photodynamic therapy. Nanotechnology. Cancer.



## Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Cancer** - fact sheet n. 297. Available from: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs297/en/>>. Accessible at: 30 Aug. 2016.
- 2 HUANG, Z. A review of progress in clinical photodynamic therapy. **Technology in Cancer Research & Treatment**, v. 4, n. 3, p. 283, 2005.
- 3 VIVERO-ESCOTO, J. L.; Vega, D. L. Stimuli-responsive protoporphyrin IX silica-based nanoparticles for photodynamic therapy *in vitro*. **RSC Advances**, v. 4, n. 28, p. 14400-14407, 2014. doi: 10.1039/C4RA01135J .



## PG102

# Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas: validando as regras de substituição na montagem do filamento

LEONARDO, D. A.<sup>1</sup>; GARRATT, R.<sup>1</sup>

diego.leonardo326@gmail.com

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

Septinas são GTPases que desempenham um papel importante na estrutura da célula, formando o quarto componente do citoesqueleto e participando no recrutamento de outras proteínas. Septinas formam heterofilamentos que são estabilizados por interações entre as subunidades através de dois tipos de interface: G e NC. Estas interfaces foram observadas na estrutura cristalografia do heterocomplexo SEPT2-SEPT6-SEPT7, mas devido à baixa resolução (4 Å) não foi possível analisar em detalhe os determinantes estruturais responsáveis pela sua formação assim como para entender a disposição de cada subunidade ao longo do filamento. (1) Mesmo assim, foi observado, por Kinoshita em 2002, que septinas pertencentes ao mesmo grupo podem ocupar posições equivalentes no filamento assim gerando uma diversidade de heterocomplexos. O desafio de entender a especificidade de polimerização do filamento se baseia na observação surpreendente de interfaces promiscuas formadas por septinas isoladas. Tais interações levam a formação de homofilamentos estabilizados por interfaces do tipo G e NC e são observadas em várias estruturas cristalográficas relatadas na literatura, mesmo se não existem em filamentos fisiológicos. Para abordar este fenômeno o nosso grupo inicialmente trabalhou na co-expressão e co-purificação de complexos triméricos e tetraméricos com fins estruturais, mas sem muito êxito devido à falta de equimolaridade nas amostras. Por este motivo o candidato propôs no projeto de mestrado (2014) uma abordagem alternativa, estudar uma única interface, sendo que o estudo foi focado na interface G entre SEPT5 e SEPT8. Os resultados mostram uma maior estabilidade do complexo SEPT5-SEPT8 frente a SEPT8 sozinha, grande tendência à cristalização do heterocomplexo e finalmente foi identificada uma interação entre aminoácidos únicos para estas septinas (Phe131 e Thr19, em SEPT5 e SEPT8 respectivamente), a qual é proposta como a mais importante para a especificidade e estabilidade desta interface G. Este projeto de doutorado propõe ampliar o estudo da especificidade de interação da interface G entre septinas do grupo II (grupo da SEPT8) e grupo III (grupo da SEPT5), validando quantitativamente a observação de Kinoshita, assim como estudar a interação entre Phe131 e Thr19 com o objetivo de entender a sua importância na estabilidade e especificidade na interface. Também será explorada a ideia de que coiled-coils pertencentes a septinas do grupo III são os responsáveis pela estabilidade de complexos de mais alta ordem, onde, coiled-coils antiparalelos podem servir como ligações cruzadas entre filamentos. Finalmente serão feitos estudos de microscopia eletrônica para o complexo SEPT3-SEPT7-SEPT8-SEPT5 com fins de estabelecer a disposição de cada subunidade no filamento.

**Palavras-chave:** Septinas. Interação proteína-proteína. Coiled-coil.

**Referências:**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

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.



## PG103

# Spectroscopic characterization of charge photogeneration and recombination dynamics in a capacitive organic solar cell

LIMA FILHO, J. B.<sup>1</sup>; MIRANDA, P. B.<sup>1</sup>

joaquimbrasil@ifsc.usp.br

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

Organic electronics is a research field of great interest in the scientific community due easy and low cost device fabrication, in addition to the versatility of organic materials. Among the electronic devices of wide interest are organic solar cells for low-cost and renewable power sources. However, the last generation of organic solar cells face performance limitation due to poor charge transport properties. (1) Recently proposed (2), a new design of organic solar cells, called light-harvesting capacitors (LHCs), is independent on charges transport because light causes nanodipole generation by charge separation at the interface between donor and acceptor organic layers. Therefore, the voltage at the electrodes results from the combination of the nano-voltage generated at each donor/acceptor bilayer. In this work, we compare the theoretical analysis of the device to experimental results obtained from fabricated LHCs of ionic derivatives of perylene and polythiophene with Layer-by-Layer (LbL) self-assembly, a simple and low-cost technique that allows the fabrication of hundreds of nanometric active layers, which should increase the device efficiency. The active layers, sandwiched by insulating layers of polyelectrolytes, were deposited on glass/ITO substrates. The ITO works as transparent electrode. The other electrode was fabricated by metallic deposition on the top of the device. Ultrafast pump-probe spectroscopy (PPS) was used to study the charge photogeneration, which occurs in less than 100 fs after light absorption. On the other hand, charge recombination is much slower, and was studied by continuous-wave photo-induced absorption spectroscopy (cw-PA). The results indicate the generation of long-lived charges with 15% efficiency and a 0.3 ms lifetime, indicating good prospects for power conversion efficiency of LHCs.

**Keywords:** Organic solar cells. Light harvesting capacitors. cw-PA characterization.

### Referências:

1 FACCHETTI, A. pi-conjugated polymers for organic electronics and photovoltaic cell applications. **Chemistry of Materials**, v. 23, n. 3, p. 733-758, 2011. doi: 10.1021/cm102419z.

2 GARBUGLI, M. et al. Light energy harvesting with nano-dipoles. **Nanoscale**, v. 4, n. 5, p. 1728-1733, 2012. doi: 10.1039/c2nr11732k.





## PG104

# Functional characterization of *Trypanosoma brucei* spliceosomal protein U515K

LIMA, A. L. de<sup>1</sup>; SILVA, M. T. A. da<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

ana.lima@hotmail.com

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

The *trypanosomatidae* family comprehends a large number of protozoan parasites, including important etymologic agents of human diseases. These parasites show highly conserved biochemical processes such as the particular process of messenger RNA processing called trans-splicing. For trans splicing to occur, all mature messengers are initialized by the same 40 nucleotides sequence called splice leader (SL) and require ribonucleoproteins (snRNPs) U1, U2, U4/U6 e U5 complexes formed by small RNAs rich in uridine strongly bound to proteins.(1) U515k is a U5 specific protein, highly conserved in eukaryotes. 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 tri snRNP formation (2) and the cryo-electron microscopy of *S. cerevisiae* s tri-snRNP showed that U515k homologous Dib1, together with Prp8, stabilizes the hairpin formed by U6 snRNA during the complex catalytic activation.(3) Previous studies showed that *T. brucei* s U5-15k possesses a self cleavage activity and small angle x-ray scattering (SAXS) together with homology modelling showed the presence of a flexible region that may be preventing crystallization. The scope of this project is the functional characterization of U515k expressing protein mutants in vivo through PTPtag as well as crystallization tests using a mutated U515k, where the flexible region was deleted, as well as U515k interacting with U5102K. The two mutations were performed separately on U515k. The first one changing its only cysteine for an Alanine (U515Ka) and the second a deletion of 11 amino acid residues (U515kb). New cleavage tests using U515ka showed that, contrary to previous beliefs, the cysteine residue was not responsible for the protein s self cleavage activity and the U515kb crystallization test did not result in any crystals. For the co-expression of U515k and U5102k, these two proteins are being cloned in the expression vector pETduet. Among future prospects are new crystallizations tests are being conducted using PMSF instead of DTT to prevent self cleavage, since it worked better with the mutants and the construction of new mutants, changing the self cleavage site residues.

**Keywords:** Splicing. Trypanisomatids. U5-15k.

### Referências:

1 MICHAELI, S. . Trans-splicing in trypanosomes: machinery and its impact on the parasite transcriptome. **Future Microbiology**, v. 6, n. 4, p. 459-74, 2011.

2 SILVA, M. T. A. et al.. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins. **Memorias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 106, n. 2, p. 130-138, 2011. doi: 10.1590/S0074-02762011000200003 .



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 NGUYEN, T. H. D. et al.. Cryo-EM structure of the yeast U4/U6.U5 tri-snRNP at 3.7 a resolution .  
**Nature**, v. 530, p. 298-301, 2016. doi: 10.1038/nature16940.

## PG105

# Estudos estruturais e moleculares 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.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

gustavo.alvares.lima@gmail.com

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

O destaque da cana-de-açúcar como fonte de energia renovável tem motivado a busca por melhorias no processo de cultivo e processamento da planta, buscando o aumento da produtividade dos canaviais. (1) Dentre os fatores limitantes para o aumento da produção de cana-de-açúcar, destaca-se a ocorrência de fitodoenças, como por exemplo a escaldadura das folhas, causada pela bactéria *Xanthomonas albilineans*. Essa doença causa a diminuição do valor energético do caldo extraído da planta, e a ausência de qualquer tratamento químico ou biológico acarreta na necessidade de reforma precoce dos canaviais, causando perdas significativas para o agronegócio brasileiro. (2) Portanto, existe uma grande necessidade no desenvolvimento de novas moléculas capazes de atuar como defensivos agrícolas com eficiência e especificidade. Atuar nas vias bioquímicas essenciais do patógeno é uma estratégia consagrada no desenvolvimento de moléculas bioativas. Desse modo, estratégias distintas de identificação de inibidores foram utilizadas. Na primeira, avaliou-se o potencial inibidores de moléculas de origem natural ou sintética em ensaios fenotípicos contra a cultura de *X. albilineans*, identificando dois derivados nitrotiofeno e nitrofurano capazes de inibir o crescimento bacteriano a 2 mM. Na segunda estratégia, duas vias biossintéticas essenciais para a *X. albilineans* foram selecionadas, i. biossíntese de folatos e ii. biossíntese de albicidinas, e três proteínas dessas vias investigadas: di-hidropterina pirofosfoquinase (XaHPPK), di-hidroneopterina aldolase (XaDHNA) e fosfopanteteinil transferase (XaPPT). Métodos em biologia molecular e biologia estrutural foram empregados para a obtenção de proteínas puras e solúveis, visando-se a elucidação das estruturas tridimensionais e caracterização bioquímica dos alvos moleculares. Os experimentos conduzidos com as proteínas XaPPT e XaDHNA resultaram em uma expressão solúvel e em grande quantidade para ambas as proteínas, condições necessárias para avançar nas investigações de cinética enzimática e cristalografia de raios x. Os estudos conduzidos com a proteína XaHPPK para caracterização cinética possibilitou o cálculo do  $K_d$  aparente ( $K_d = 97 \pm 3 \mu\text{M}$ ) para o substrato. Os experimentos de biologia estrutural possibilitaram a aquisição de um conjunto de dados de difração de raios X a 1,6 Å, e o processamento inicial dos dados mostraram-se promissores para a obtenção da estrutura 3D da proteína, atualmente em estágio de refinamento com valores de  $R_{\text{work}}$  e  $R_{\text{free}}$  iguais a 24 e 21, respectivamente.

**Palavras-chave:** Cana-de-açúcar. *Xanthomonas albilineans*. Cristalografia.

### Referências:

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



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

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



## PG106

### Termodinâmica de um sistema quântico aberto

LIMA, R. B. B.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

rafael.bruno.lima@usp.br

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

A teoria de sistemas quânticos abertos tem sido por muitos anos alvo de diversas pesquisas. Assim entender suas propriedades básicas tem sido crucial para o desenvolvimento de novas tecnologias, como por exemplo, o estudo de materiais de banda fotônica. Recentemente uma certa atenção tem sido tomada acerca da caracterização dos processos não Markovianos, pois estes podem induzir o retorno das características quânticas iniciais do sistema. Uma das formas de gerar não Markovianidade se dá por meio da injeção de um ruído estocástico clássico no sistema. (1-2) Nosso trabalho consiste em utilizar todo o aparato teórico de sistemas quânticos abertos na forma de equações mestra e termodinâmica quântica, aplicado a um ciclo de resfriamento quântico de três níveis sob a injeção de um ruído estocástico Gaussiano. (3) Mais precisamente, será estudado como a não Markovianidade pode influenciar o sistema em relação a troca de calor e o trabalho, modificando a eficiência do processo.

**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. 317-320, 1998. doi: 10.1103/PhysRevLett.81.317.
- 3 PALAO, J.P.; KOSLOFF, R.; GORDON, J. M. Quantum thermodynamic cooling cycle. **Physical Review E**, v. 64, n. 5, p. 056130-1-056130-8, 2001. doi: 10.1103/PhysRevE.64.056130.



## PG107

# Investigating the endocytosis and exocytosis of nanomaterials

LINS, P.<sup>1</sup>; CANCINO-BERNARDI, J.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

ppincela@gmail.com

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

Despite the rapid progress of nanotechnology for application in different fields of science, the toxicological effects of nanomaterials are not well understood. Nanotoxicology rises to elucidate the interactions of nanomaterials with biological systems, focusing in how the physical chemistry properties induce toxic biological response. (1) It is known that the incorporation of nanomaterials occurs primarily by endocytosis constituted by two main processes: pinocytosis and phagocytosis. (2) Furthermore, toxicological effects are not only associated with endocytosis. Exocytosis, for example, can result in an extracellular modified nanomaterial, which can be more toxic than the starting material. (2-3) This project aims to evaluate the –endocytosis and exocytosis of gold nanorods using four cell lines. Pharmaceuticals inhibitors will be applied to understand which are the preferable pathways of endocytosis. Flow cytometry, fluorescence and confocal microscopy will be used to elucidate the interactions of nanorods with cells. (2) Such studies may help to comprehend the toxicity of nanomaterials at the molecular scale and also to bring important benefits to the development of nanomedicine.

**Keywords:** Nanomaterials. Endocytosis. Exocytosis.

### Referências:

1 ARORA, S.; RAJWADE, J. M.; PAKNIKAR, K. M. Nanotoxicology and in vitro studies: the need of the hour. **Toxicology and Applied Pharmacology**, v. 258, n. 2, p. 151-165, 2012.

2 LIU, X. et al. . Size dependent cellular uptake of rod-like bionanoparticles with different aspect ratios. **Scientific Reports**, v. 6, p. 2-11, 2016. doi: 10.1038/srep24567.

3 IVERSEN, T. G.; SKOTLAND, T.; SANDVIG, K.. Endocytosis and intracellular transport of nanoparticles: present knowledge and need for future studies.. **Nano Today** , v. 6, n. 2, p. 176-185, 2011. doi: 10.1016/j.nantod.2011.02.003.



## PG108

# Chemical and crystallographic characterization of roméite-group minerals

LOPES, G. A. C.<sup>1</sup>; ANDRADE, M. B.<sup>1</sup>; ATENCIO, D.<sup>2</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

g.anderson@ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Instituto de Geociências - USP

The roméite group is included in the pyrochlore supergroup with general formula  $A_2B_2X_6Y$ . (1) In this group of oxides, the main characteristic is the predominance of Sb in the crystallographic position B and varying amounts of Ca, Na, Ba, K, Fe, Mg, Mn, REE, Sr, Nb, Ta, Ti, K, and Ti. The roméite is a source of rare metals and Sb, which is used in the production of alloys and in the cosmetic industry. Furthermore, compounds of pyrochlore structure have magnetic geometric frustration and have been intensively investigated over the last decades. (2) Due to their complex structure type, roméite can also be host of many other rare elements, whose presence and distribution can tell scientists much about the natural crystallization conditions of the rock in which roméite has formed. The data for minerals of the roméite group are still scarce, although these minerals are present in a wide variety of colors and wide variation in chemical composition, according to what preliminary results suggest. The main localities which are suppliers of mineral, where studies have already been developed in previous steps, and where we returned during this study are Tripuí, Ouro Preto, Minas Gerais; Janchev, Kalugeri Hill (Macedonia); Praborna, Saint-Marcel (Italy); Torino, Piemonte (Italy) among others. The main purposes of this work are to achieve characteristic spectra by Raman spectroscopy, crystallographic data by X-ray diffraction, and chemical composition by electron microprobe, classifying the present species. There is a great possibility of new species existing in this group of minerals.

**Palavras-chave:** Single crystal. Raman spectroscopy. Electron microprobe.

### Referências:

1 ATENCIO, D. et al. The pyrochlore supergroup of minerals: nomenclature. **Canadian Mineralogist**, v. 48, n. 3, p. 673-698, 2010.

2 ZLHOU, H. D. et al. Spin glass transitions in the absence of chemical disorder for the pyrochlores  $A_2Sb_2O_7$  (A= Mn, Co, Ni). **Journal of Solid State Chemistry**, v. 183, n. 4, p. 890-894, 2010.



## PG109

# Medição da razão de fluxos de núcleos nos raios cósmicos

LORDELLO, V.<sup>1</sup>; VECCHI, M.<sup>1</sup>

vitor.lordello@usp.br

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

Raios Cósmicos são partículas carregadas e altamente energéticas que chegam à Terra do espaço. Os mecanismos de produção, aceleração e propagação dessas partículas não são completamente conhecidos e o estudo do fluxo e da composição dos raios cósmicos ajudam a esclarecê-los. (1) O AMS (Alpha Magnetic Spectrometer) é um detector de partículas instalado na ISS (International Space Station) que registra as partículas que passam pelo seu interior, realizando medidas redundantes de suas propriedades. Os diferentes núcleos nos raios cósmicos têm diferentes fontes, os chamados raios primários são acelerados em diferentes fontes astrofísicas enquanto que outros, chamados de raios secundários, são produzidos ao longo da propagação dos primários com o meio inter-estrelar. Será realizado um estudo da razão de fluxos de diferentes núcleos, medidos com o AMS, com particular atenção a razões entre núcleos primários e secundários. Para isso é necessário o estabelecimento de critérios de seleção para estudar os eventos registrados pelo AMS e para a diferenciação de núcleos, assim como uma medida da resolução da medida de momento realizada pelo AMS.

**Palavras-chave:** Raios cósmicos. AMS. Astropartículas.

### Referências:

1 OLIVA, A. **High charge cosmic rays measurement with the AMS-02 silicon tracker.** 2006. 161 p. PhD Thesis (Dottorato di ricerca in Fisica) - Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Università degli studi di Perugia, Perugia, 2007.





## PG110

# Random walk method applied to investigate the NMR measurement

LUCAS-OLIVEIRA, E.<sup>1</sup>; ARAÚJO-FERREIRA, A. G.<sup>1</sup>; FORTULAN, C. A.<sup>2</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

everton.lucas.oliveira@usp.br

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

<sup>2</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Nowadays, most of the efforts are in NMR applied to study the molecular dynamics in fluids within the porous media and it have been essential for better understanding bones, ceramics, cements and fluid transport in reservoir rock. (1) Unfortunately, the analyses of fluid-saturated porous media have a complexity due to morphology, chemical composition and fluids dynamics. Since the magnetic diffusion in a confined geometry (pores, fractures) requires specific boundary conditions, the theoretical solutions are restricted to some special problems. (2) We use the Random Walk Method to the nuclear spins diffusion along a digital porous media to simulate the diffusion and magnetic relaxation process of the fluid molecules. The computation physics model simulates one-dimensional and bi-dimensional NMR techniques. (3) The relaxation time distributions T1 and T2 are obtained by the software with experiment as CPMG (Carr-Purcell-Meiboom-Gill), Inversion Recovery, and T1xT2 Correlation. The main results of these methods can be analyzed in different boundary conditions and for a good approximation between the numerical and experimental results, is necessary to preserve the complexity of translational diffusion through the micro structures on the digital rocks. Therefore, we use the 3D micro-CT images to construct the digital reservoir rocks. The simulated and experimental results from syntactic porous media are compared and a measurement of the porous size distribution from the relaxation times is in a good agreement with previous determinations by Brownstein-Tarr. These results indicate the potential of computational physics in the analyses of the NMR in complex porous materials, and the importance of the NMR 2D experiments to characterization the dynamics of the fluid. (3)

**Keywords:** Pore size distribution. NMR. Relaxivity.

### Referências:

1 SONG, Y.-Q. Magnetic resonance of porous media (MRPM): a perspective. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 229, p. 12-24, 2013. doi: 10.1016/j.jmr.2012.11.010.

2 BROWNSTEIN, K. R.; TARR, C. E. Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells. **Physical Review A**, v. 19, n. 6, p. 2446-2553, 1979. doi: 10.1103/PhysRevA.19.2446.

3 D'EURYDICE, M. N. et al. T2-filtered T2-T2 exchange NMR. **Journal of Chemical Physics**, v. 144, n. 20, p. 204201-1-204201-10, 2016. doi: 10.1063/1.4951712.

## PG111

# Planejamento e otimização de novos inibidores de polimerização da proteína tubulina

MAGALHÃES, L. G.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

luma.magalhaes@usp.br

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

Os microtúbulos estão entre os alvos de maior sucesso na terapia anticâncer. (1) Compostos que modulam a tubulina, unidade proteica dos microtúbulos, levam as células à apoptose através de interrupção da mitose. Além disso, alguns fármacos antitubulina podem agir como agentes anti-angiogênicos. Entretanto, muitos destes compostos apresentam problemas relacionados à biodisponibilidade, toxicidade e resistência. (2) Tais substâncias são, em geral, produtos naturais estruturalmente complexos que possuem diversos estereocentros. Neste contexto, foi desenvolvida uma série de acridinonas (3), inspirada no produto natural podofilotoxina. Desta série, 4 compostos apresentaram promissoras atividades de inibição da migração celular e da polimerização da tubulina, além de seletividade quanto à citotoxicidade em células tumorais e saudáveis. A partir do composto mais potente identificado (IC<sub>50</sub> de inibição da polimerização da tubulina de  $0,9 \pm 0,2 \mu\text{M}$ ; CC<sub>50</sub> contra MDA-MB-231 de  $0,11 \pm 0,02 \mu\text{M}$  e IC<sub>50</sub> de inibição da migração celular de  $0,33 \pm 0,02 \mu\text{M}$ ), uma série de dez novas moléculas foi proposta por meio de métodos de SBDD (*structure based drug design*) com o objetivo de realizar estudos de SAR (*structure activity relationship*), que servirão como guia durante o processo de otimização molecular. Cinco compostos foram sintetizados e avaliados nos modelos de migração celular, citotoxicidade e de polimerização da proteína tubulina. Três destas substâncias se mostraram ativas e seus parâmetros biológicos foram determinados, possuindo IC<sub>50</sub> de inibição da polimerização da tubulina entre 1,3 e 24  $\mu\text{M}$ ; CC<sub>50</sub> contra MDA-MB-231 entre 0,13 e 3,6  $\mu\text{M}$  e IC<sub>50</sub> de inibição da migração celular entre 0,3 e 0,6  $\mu\text{M}$ . Concomitantemente, dez novos análogos foram planejados baseados nos resultados obtidos para as cinco primeiras substâncias e em estudos de docagem molecular. Novos derivados com o objetivo de melhorar parâmetros físico-químicos também estão sendo planejados. Ensaio de atividade anti-angiogênica foram padronizados e validados por controles negativos e positivos. Os dois compostos mais ativos nos ensaios anteriores foram avaliados e se mostraram capazes de inibir a tubulogênese de células endoteliais *in vitro*. A caracterização biológica destes compostos continua em andamento e permitirá a elucidação de aspectos estruturais importantes para o desenvolvimento da série. A produção da tubulina humana recombinante (cinco linhagens celulares estáveis produzindo diferentes isoformas da tubulina já estão estabelecidas) também está em andamento e o protocolo de purificação foi estabelecido com sucesso. A atividade dos compostos frente às isoformas será determinada para auxiliar na elucidação de aspectos relacionados à resistência e seletividade dessas substâncias. Além disso, será feita a separação dos enantiômeros para verificar o possível papel de eutômeros e distômeros.

**Palavras-chave:** Câncer. Tubulina. Planejamento de fármacos.

**Referências:**



1 DUMONTET, C.; JORDAN, M. A. Microtubule-binding agents: a dynamic field of cancer therapeutics. **Nature Reviews Drug Discovery**, v. 9, n. 10, p. 790-803, 2010.

2 KAVALLARIS, M. Microtubules and resistance to tubulin-binding agents. **Nature Reviews Cancer**, v. 10, n. 3, p. 194-204, 2010.

3 MAGALHÃES, L. G. et al. Discovery of a series of acridinones as mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. **PLoS One**, v. 11, n. 8, p. e0160842-1-e0160842-17, 2016.



## PG112

# A study of the thermodynamics of nanomachines

MALVAZI, A. H. A.<sup>1</sup>; BRITO, F.<sup>1</sup>

andrehamalavazi@ifsc.usp.br

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

The description of thermodynamical systems has seen the emergence of new tools capable of establishing relations between equilibrium quantities and processes performed out of equilibrium: the fluctuation theorems. In this context the most notorious results are expressed by the well known Jarzynski equality and Crooks relation. (1) Beyond the classical framework, more recently it was verified that these fluctuation relations still hold for quantum systems under specific situations. (2) These results are being obtained in the context of the field coined as quantum thermodynamics and it is expected that this knowledge could lead to new insights into the optimization of current technology and development of quantum devices, in particular quantum thermal engines. However, besides its rapid growth (3) it is important to notice that this field is still in its childhood, and naturally one finds many open questions to be answered. For instance, it is not yet fully understood how general thermodynamical properties could be translated to this regime. In fact, even the concept of quantum work and heat are not established yet. This project intends to address such questions. It proposes to study and investigate the quantum fluctuation relations, and the definitions of thermodynamic quantities, such as heat and work, in this regime. In particular, it is expected to obtain novel and coherent descriptions of such quantities.

**Keywords:** Quantum thermodynamics. Quantum fluctuation relations. Non-equilibrium systems.

### Referências:

- 1 JARZYNSKI, C. Nonequilibrium equality for free energy differences. **Physical Review Letters**, v. 78, n. 14, p. 2690-2693, 1997. doi: 10.1103/PhysRevLett.78.2690.
- 2 CAMPISI, M.; HÄNGGI, 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.
- 3 MILLEN, J.; XUEREB, A. Perspective on quantum thermodynamics. **New Journal of Physics**, v. 18, p. 011002-1-011002-6, 2016. doi: 10.1088/1367-2630/18/1/011002.



## PG113

# Desenvolvimento de uma plataforma de métodos de IRM (suite) para a observação de sistemas com T2 muito curtos

MARASSI, A. G.<sup>1</sup>; GOMES JUNIOR, F. G.<sup>2</sup>; TANNÚS, A.<sup>1</sup>

agide@usp.br

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

<sup>2</sup>Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz- USP

A Imagem por Ressonância Magnética (IRM) é uma técnica experimental completamente não invasiva e não destrutiva, originada a partir da interação com um campo magnético de certos núcleos do sistema físico analisado, de forma que pode ser utilizada para adquirir imagens com alta resolução e contraste. Entretanto, não existe uma investigação detalhada em ressonância magnética que vise a análise da morfologia interna de sementes, pelo fato das técnicas tradicionais não serem capazes de detectar sinais de muito curta duração da componente transversal da magnetização que ocorrem nessas estruturas. Já, técnicas convencionais como os raios X, apresentam dificuldades na avaliação de danos quando esses se encontram em estágios iniciais de ocorrência. (1) O objetivo principal desta pesquisa é a implementação de uma plataforma de métodos de IRM para a observação de sistemas com T2 muito curtos. Serão estudadas sementes de soja e de milho através de imagens obtidas pela plataforma proposta, como Ultra-short Echo Time (UTE), Zero Echo Time (ZTE) (2) e Sweep Imaging with Fourier Transformation (SWIFT). (3) Também, para efeito de comparação, serão adquiridas imagens por técnicas convencionais de raios-X. É esperado que com esta proposta possam ser avaliadas alterações na atividade metabólica de tecidos de sementes, oriundas de danos mecânicos ou patológicos, associados com o sinal de ressonância magnética.

**Palavras-chave:** Métodos de imagem. Ressonância magnética. Análise de imagem.

### Referências:

1 FORTI, V. A.; CICERO, S. M.; PINTO, T. L. F. Avaliação da evolução de danos por "umidade" e redução do vigor em sementes de soja, cultivar TMG113-RR, durante o armazenamento, utilizando imagens de raios x e testes de potencial fisiológico. **Revista Brasileira de Sementes**, v. 32, n. 3, p. 123-133, 2010.

2 WEIGER, M.; PRUESSMANN, K. P.; HENNEL, F. MRI with zero echo time: hard pulse versus sweep pulse excitation. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 66, n. 2, p. 379-389, 2011.

3 IDIYATULLIN, D. et. al. Fast and quiet MRI using a swept radiofrequency. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 181, n. 2, p. 342-249, 2006.



## PG114

# Relógios quânticos: mecanismo de Page e Wootters

MARTINELLI, T.<sup>1</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>

tiago.martinelli@usp.br

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

Na formulação usual da mecânica quântica, tempo não é um observável legítimo. Como pode ser visto, ao utilizar-se da equação de Schrödinger, o tempo é apenas um parâmetro lido por um relógio externo. Porém, poderia-se considerar um relógio dentro de um sistema quântico, o qual, além da periodicidade, teria uma contagem regida pelas leis da mecânica quântica, denominado, neste trabalho, relógio quântico. Tal consideração é necessária para entender a natureza do tempo na mecânica quântica, bem como para otimizar tecnologias quânticas atuais, como precisão de leitura e sincronização de relógios. Page e Wootters (1) utilizaram um sistema composto de spins com Hamiltoniano fixo, no qual a evolução temporal é recuperada por meio de um subsistema, considerando o outro subsistema como relógio. Isto pode ser interpretado como a emergência do tempo a partir da comparação (uma fase relativa) entre dois spins. Tal ideia foi verificada recentemente em Moreva et al. (2) Nosso trabalho objetiva a caracterização de relógios quânticos utilizando o mecanismo de Page e Wootters. Por meio de recursos da Teoria da Informação Quântica, como a teoria de assimetria e sistemas de referências quânticos (3), estamos analisando como tratar fases relativas do ponto de vista de um subsistema em relação ao outro. Isso poderá levar a novos protocolos para sincronização de relógios. Além disso, pretende-se obter condições que devem ser impostas no subsistema do relógio para otimizar medidas de tempo de relógio.

**Palavras-chave:** Fundamentos de mecânica quântica. Teoria da informação quântica. Relógios quânticos.

### Referências:

1 PAGE, D. N.; WOOTTERS, W. K. Evolution without evolution: dynamics described by stationary observables. **Physical Review D**, v. 27, n. 12, p. 2885-2892, 1983.

2 MOREVA, E. et al. Time from quantum entanglement: an experimental illustration. **Physical Review A**, v. 89, n. 5, p. 052122-1-052122-6, 2014.

3 BARLETT, S. D.; RUDOLPH, T.; SPEKKENS, R. W. Reference frames, superselection rules, and quantum information. **Reviews of Modern Physics**, v. 79, n. 2, p. 555-609, 2007.



## PG115

# Análise das interfaces de interação heterotípicas entre septina-septina

MARTINS, C. S.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>; MACEDO, J. N. A.<sup>1</sup>

carlamartins@ifsc.usp.br

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

Septinas pertencem a uma família de proteínas de ligação a GTP e que estão presentes em diversos organismos eucariotos. Sua participação nos processos celulares incluem, além da citocinese, determinação e manutenção da polaridade celular, associação a membranas, movimento celular, tráfego de vesículas, entre outros. As septinas tipicamente 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 se polimerizam, constituindo filamentos.(1) 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. Esta estrutura revelou que a formação do filamento envolve interações conservadas entre domínios G, estando os demais domínios desordenados. Além disso, dois tipos de interface se alternam ao longo do filamento, chamadas interface G (pois encontram-se os sítios de ligação ao nucleotídeo) e interface NC (formada por extensões nas regiões N- e C- terminais do domínio G). As interações entre SEPT7-SEPT6 são do tipo NC, ao contrário do observado na estrutura para a interação entre SEPT6-SEPT2 que é do tipo G. Até o momento, pouco se sabe sobre os fatores que determinam a seleção do parceiro correto de interação para a montagem dos heterocomplexos. Entretanto, várias evidências sugerem que os domínios C sejam os principais responsáveis por tal seleção.(2) Neste contexto, os objetivos deste projeto são avaliar a importância dos domínios C na seleção das septinas parceiras para formar a interface NC, além da importância da ligação do nucleotídeo para interação pela interface G. Para isso, uma septina quimérica foi produzida de forma que o C-terminal de SEPT6 substituiu o mesmo domínio na estrutura da SEPT2, gerando a quimera SEPT2\_6C. As proteínas SEPT7, SEPT6, SEPT2 e SEPT2\_6C foram expressas separadamente em bactérias. A análise por dicroísmo circular sugeriu aumento de estabilidade quando as proteínas SEPT7 e SEPT6 são misturadas após a purificação, indicando interação já esperada, e formação do heterodímero NC, que foi comprovado por ressonância plasmônica de superfície. O mesmo não ocorreu com SEPT7 e SEPT2. Uma vez que os controles funcionaram, o próximo passo é testar a interação SEPT7 com a quimera SEPT2\_6C. Para avaliar a interface G, foram contruídos mutantes de SEPT2 no domínio GTPásico, SEPT2(T78M) e SEPT2(D185N), já que esses resíduos são importantes na hidrólise e ligação do nucleotídeo, respectivamente.(3) A análise de oligomerização por cromatografia de exclusão molecular mostrou um deslocamento no volume de eluição das proteínas tanto quando SEPT2 foi expressa sozinha, quanto quando coexpressa com SEPT6, indicando, portanto, que as mutações podem ter sido suficientes para impedir a complexação das proteínas. Ensaios de atividade estão sendo realizados para validar a funcionalidade das mutações.

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



### Referências:

- 1 CAO, L. et al. The evolution, complex structures and function of septin proteins. **Cellular and Molecular Life Sciences**, v. 66, n. 20, p. 3309-3323, 2009. doi: 10.1007/s00018-009-0087-2.
- 2 ALMEIDA, I. A. et al. Septin C-terminal domain interactions: implications for filament stability and assembly. **Cell Biochemistry and Biophysics**, v. 62, p. 317-328, 2012. doi: 10.1007/s12013-011-9307-0.
- 3 KUO, Y. C. et al. SEPT12 orchestrates the formation of mammalian sperm annulus by organizing core octameric complexes with other SEPT proteins. **Journal of Cell Science**, v. 128, p. 923-934, 2015. doi: 10.1242/jcs.158998.





## PG116

# Estudo da dinâmica de absorção multi-fotônica do GaN através da formatação de pulsos

MARTINS, R. J.<sup>1</sup>; SIQUEIRA, J. P.<sup>1</sup>; DIPOLDI, J.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

rjuliano@ifsc.usp.br

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

Neste trabalho apresentamos resultados provenientes do processo de absorção multi-fotônica do semicondutor nitreto de gálio (GaN) através do aparato de formatação de pulsos. GaN é um semicondutor de gap direto de 3.4 eV (1) e apresenta duas bandas de emissão óptica: (i) banda de éxciton, localizada em 365 nm e (ii) banda de defeitos - localizada em 550 nm. Este material tem sido amplamente estudado nos últimos anos devido suas diversas aplicações. (2) Inicialmente realizamos caracterizações ópticas lineares no material para um entendimento preliminar do semicondutor. Em seguida, usamos um sistema laser amplificado de Ti:Safira operando a uma taxa de repetição de 1 kHz, energia de 1 mJ e centrado em 770 nm, com banda de 25 nm e duração de 40 fs. O pulso comprimido incide sobre um aparato de formatação de pulsos que contém um elemento modular de fase e amplitude espectral de 640 pixels. Com este sistema estudamos a dependência da dinâmica de absorção multi-fotônica, assim como a dependência da emissão do material através da aplicação de uma fase espectral. Tal estudo é importante para revelar mecanismos eletrônicos e ópticos no material, que podem ajudar no desenvolvimento de dispositivos semicondutores. Os resultados revelam um processo de absorção multi-fotônica de alta ordem (4 fótons) na banda de éxciton, e um comportamento sub-linear para a banda de defeitos, os quais se alteram com a aplicação de um chirp linear no pulso.

**Palavras-chave:** GaN. Formatação de pulsos . Absorção multifotônica.

### Referências:

1 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R.; RAM-MOHAN, L. R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. **Journal of Applied Physics**, v. 89, n. 11, p. 5815-5875, 2001.

2 DAVIS, R. F. III-V nitrides for electronic and optoelectronic applications. **Proceedings of the IEEE**, v. 79, n. 5, p. 702-712, 1991.



## PG117

# Nova geração de detectores de múons para o observatório Pierre Auger

MARTINS, V. B.<sup>1</sup>; SOUZA, V.<sup>1</sup>

victor@ifsc.usp.br

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

O projeto de mestrado se insere em uma colaboração internacional para desenvolver e produzir 40 Resistive Plate Chamber (RPCs), que funcionam como detectores de múon. (1) A detecção destas partículas é importante para possibilitar a separação da componente muônica da componente eletromagnética de um chuveiro atmosférico iniciado por raio cósmico e por raio gama, respectivamente. Além disso, essa separação das componentes nos leva a um cálculo mais preciso da energia da partícula inicial e das condições iniciais do chuveiro, uma vez que os múons são produzidos principalmente na alta atmosfera e não interagem tão fortemente com ela quanto os elétrons. Resumidamente, os objetivos deste projeto são: desenvolver junto com a indústria nacional e os colaboradores portugueses uma metodologia para fabricação de RPCs no Brasil; desenvolver um experimento de teste de cada RPC; analisar os dados deste experimento de teste, atestando a qualidade das RPCs; se houver tempo, instalar RPCs no Observatório Pierre Auger e analisar os dados dos primeiros chuveiros a serem detectados (1). Paralelamente, simulações serão desenvolvidas usando o ambiente Offline da colaboração Pierre Auger, para comparação com os resultados. No status atual do projeto ainda não há resultados a serem apresentados, portanto apresentaremos no SIFSC a ideia do projeto, a hipótese, os métodos, objetivos e expectativas. Focaremos principalmente no funcionamento da RPC.

**Palavras-chave:** RPC. Múon. Chuveiro atmosférico.

### Referências:

1 SOUZA, V.; MARTINS, V. B. **Nova geração de detectores de múons para o observatório Pierre Auger.** Projeto submetido à FAPESP.



## PG118

# Fenômeno tipo Fermi-Pasta-Ulam em sistemas optomecânicos quânticos

MASCHIO, E. H. M.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

eduardo.maschio@usp.br

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

Com o intuito de investigar a recorrência de energia observada no sistema clássico não-linear de Fermi-Pasta-Ulam (1) em sistemas quânticos e também sua relação com o emaranhamento entre suas partes, foram procurados e experimentados tais sistemas físicos que possuíssem não-linearidade suficiente, de forma a construir um esquema que apresentasse possivelmente o comportamento da recorrência de energia. Como sistemas opto-mecânicos têm avançado muito nos últimos anos (2), tanto no quesito controle do sistema e manipulação de seus estados quanto na diminuição da escala, abre-se uma grande oportunidade de explorar seu estado da arte juntamente com sua não-linearidade que, apesar de não se assemelhar diretamente a um sistema como de FPU, é promissora, como demonstrado neste trabalho. Além das excitações médias, o emaranhamento bipartido (desenvolvido através do cálculo da entropia linear (3)) e um critério de "não-linearidade" desenvolvido para o problema são estudados e analisados, demonstrando uma relação direta entre o emaranhamento e as excitações.

**Palavras-chave:** Fermi-Pasta-Ulam. Sistema opto-mecânico. Não-linearidade.

### Referências:

- 1 FERMI, E. et al. **Studies of the nonlinear problems**. Disponível em: <<http://www.osti.gov/accomplishments/documents/fullText/ACC0041.pdf>>. Acesso em: 31 ago. 2016..
- 2 ASPELMEYER, M. ; KIPPENBERG, T. J.; MARQUARDT, F. Cavity optomechanics. **Review of Modern Physics**, v. 86, n. 4, p. 1391, 2014. doi: 10.1103/RevModPhys.86.1391.
- 3 PETERS, N. A.; WEI, T.; KWIAT, P. Mixed state sensitivity of several quantum information benchmarks. **Physical Review A**, v. 70, p. 052309, 2004. doi: 10.1103/PhysRevA.70.052309.



## PG119

# Modelos *in silico* preditivos nos estudos de permeabilidade e validação experimental

MATOS, K. S.<sup>1</sup>; MAGALHÃES, L. G.<sup>1</sup>; PAULI, I.<sup>1</sup>; MODA, T. L.<sup>2</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

karinamatos@ursa.ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Colegiado de Química - UNESPAR

Após ser oralmente administrado o fármaco deve ser dissolvido e solubilizado no trato gastrintestinal, 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 modelo de células Caco-2 (derivadas de adenocarcinoma humano que mimetizam os enterócitos do intestino) e 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) 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 tanto em células Caco-2 como em PAMPA, a partir de dados de permeabilidade da literatura. Além disso, foi realizada a validação experimental destes modelos, por meio dos respectivos ensaios experimentais para os seus conjuntos de moléculas denominados conjunto de validação. Estes modelos são de grande relevância, pois poderão ser aplicados nos diversos compostos em estudo no LQMC, ainda nos estágios iniciais de triagem dos candidatos a fármacos com perfis desejados de propriedades farmacocinéticas. 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 para um conjunto teste de 12 compostos, igual a 0,72. O mesmo foi observado para o modelo HQSAR Caco-2, construído a partir de um conjunto treinamento composto por 470 moléculas e um conjunto teste com 119 moléculas, apresentando os seguintes parâmetros estatísticos:  $q^2 = 0,69$ ;  $r^2 = 0,82$ ;  $r^2_{\text{predito}} = 0,71$ . Os resultados da validação experimental foram satisfatórios para ambos modelos, indicando que os modelos são capazes de prever os perfis de permeabilidade em células Caco-2 e PAMPA, principalmente para os compostos classificados como altamente permeáveis. A estratégia de modelagem molecular abordando modelos preditivos para mimetização das 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:** HQSAR. Caco-2. PAMPA.



## Referências:

- 1 MODA, T. L.; ANDRICOPULO, A. D. Consensus hologram QSAR modeling for the prediction of human intestinal absorption. **Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters**, v. 22, n. 8, p. 2889-2893, 2012.
- 2 BERMEJOA, M. et al. PAMPA - a drug absorption in vitro model: 7. Comparing rat in situ, Caco-2, and PAMPA permeability of fluoroquinolones. **European Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 21, n. 4, p. 429-441, 2004.
- 3 WATERBEEMD, H. Improving compound quality through in vitro and in silico physicochemical profiling. **Chemistry and Biodiversity**, v. 6, n. 11, p. 1760-1766, 2009.



## PG120

### Utilização de espectroscopia de fluorescência e espectroscopia Raman para avaliação de AGEs na pele para diagnóstico não invasivo de diabetes.

MATTOS, V. S.<sup>1</sup>; PAOLILLO, F. R.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, A. O.<sup>1</sup>; MATOS, L.<sup>1</sup>; ARTHUZO, G.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; CASTRÔ NETO, J. C.<sup>1</sup>

vicente.mattos@hotmail.com

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

O diabetes é uma síndrome metabólica complexa que tem complicações crônicas, como a neuropatia, dificuldade de cicatrização de feridas, arterosclerose, microangiopatia, retinopatia e nefropatia, o que caracteriza um grande problema de saúde pública. (1) O objetivo deste trabalho foi investigar o uso de espectroscopia óptica para identificar os produtos finais da glicação avançada (AGEs) na pele como biomarcadores para o diagnóstico de diabetes de modo não invasivo. (2) Cem voluntários com idade de 20 à 80 anos com e sem diabetes tipo I e II foram recrutados para participar do estudo, entretanto, 94 pacientes realizaram as avaliações e foram divididos em 8 grupos: Grupo 1 (G1): adultos de 20 a 30 anos sem diabetes com tipo de pele I à IV; Grupo 2 (G2): adultos de 30 a 40 anos sem diabetes com tipo de pele I à IV; Grupo 3 (G3): adultos de 40 a 50 anos sem diabetes com tipo de pele I à IV; Grupo 4 (G4): adultos de 50 a 60 anos sem diabetes com tipo de pele I à IV; Grupo 5 (G5): adultos acima de 60 sem diabetes com tipo de pele I à IV; Grupo 6 (G6): adultos com resistência à insulina com tipo de pele I à IV; Grupo 7 (G7): adultos com diabetes tipo I e II com tipo de pele I à IV e; Grupo 8 (G8): adultos sem diabetes com tipo de pele V e VI. Além das medidas antropométricas, composição corporal, frequência cardíaca e pressão arterial, foram realizadas 2 técnicas de diagnóstico óptico não invasivo: Espectroscopia Raman e Espectroscopia de Fluorescência para avaliar os AGEs encontrados no colágeno da pele (prolina, hidroxiprolina e pentosidina). Para análise estatística dos dados de fluorescência foram realizados os testes de Kruskal-Wallis, regressão linear, regressão múltipla e Qui-quadrado. O nível de significância considerado foi  $p < 0,05$ . O atual estudo mostrou que os maiores escores da autofluorescência dos AGEs na pele ocorrem em pessoas com idade avançada e na presença de diabetes. Ainda, os AGEs apresentam correlações positivas e significativas com a idade ( $r=0,7$ ;  $p=0,0001$ ), porcentagem de gordura ( $r=0,48$ ;  $p=0,0001$ ), índice de massa corpórea ( $r=0,4$ ;  $p=0,001$ ), circunferência de cintura ( $r=0,035$ ;  $p=0,001$ ) e pressão arterial sistólica ( $r=0,37$ ;  $p=0,0001$ ). Os dados da espectroscopia Raman mostram as principais bandas vibracionais dos AGEs na pele entre 800 e 1000  $\text{cm}^{-1}$ . (3) Portanto, tecnologias ópticas para o diagnóstico não invasivo de diabetes constituem uma estratégia para minimizar o impacto da doença e os custos com internações e tratamentos para que possa reduzir a taxa de morbidade e mortalidade.

**Palavras-chave:** Diabetes. Raman. Fluorescência.

#### Referências:

1 MILECH, A. et al. **Diretrizes da Sociedade Brasileira de Diabetes (2015-2016)**. São Paulo:



A.C. Farmacêutica, 2016. 337 p.

2 PEREIRA, L. et al. Confocal Raman spectroscopy as an optical sensor to detect advanced glycation end products of the skin dermis. **Sensor Letters**, v. 13, n. 9, p. 791-801, 2015. doi: 10.1166/sl.2015.3523.

3 ENEJDER, A. M. K. et al. Raman spectroscopy for noninvasive glucose measurements. **Journal of Biomedical Optics**, v. 10, n. 3, p. 031114-1-031114-9, 2005. doi: 10.1117/1.1920212.



## PG121

# Order-chaos transition in collective scattering of light by cold atoms

MAXIMO, C. E.<sup>1</sup>; BACHELARD, R.<sup>1</sup>

dumax1@gmail.com

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

The scattering of light by cold atoms has been the subject of intensive investigations as the long-range photon-mediated coupling between the particles gives rise to a series of many-body effects. Among the most important ones are superradiance and subradiance, where the atomic dipoles emit collectively light on resp. very short and very long time scales as compared to single atom decay. These phenomena neglect the motion of the ultracold atoms in response to the incident light, since it affects the dynamics of the system only on much longer time scales due to their inertia. However, in the limit where external degrees of freedom of the atoms are important, the optical forces between them may lead to non-trivial spatial effects, such as one-dimensional ordering (lattices) (1), optical binding, and can even mimic low-dimensional gravity. (2) In this work we focus on the chaotic nature of the atom dynamics that undergo scattering of light in a magneto-optical trap. In particular, we show that despite the presence of damping forces, a threshold on the system size can always be reached where chaos arises. An important goal is to identify a universal parameter that describes the order-chaos transition, obtaining prediction on the very large systems reached in experiments.

**Keywords:** Scattering of light. Chaos. Cold atoms.

### Referências:

1 CHANG, D. E.; CIRAC, J. I.; KIMBLE, H. J. Self-organization of atoms along a nanophotonic waveguide. **Physical Review Letters**, v. 110, n. 11, p. 113606-1-113606-6, 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.110.113606.

2 BARRÉ, J.; MARCOS, B.; WILKOWSKI, D. Nonequilibrium phase transition with gravitational-like interaction in a cloud of cold atoms. **Physical Review Letters**, v. 112, n. 13, p. 133001-1-133001-5, 2014. doi: 10.1103/PhysRevLett.112.133001.





## PG122

### Sugarcane bagasse adapted microbial community from compost: from the metatranscriptome to enzyme characterization

MELLO, B. L.<sup>1</sup>; ALESSI, A. M.<sup>2</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>; RIAÑO-PACHÓN, D. M.<sup>3</sup>; MCQUEEN-MASON, S.<sup>2</sup>; BRUCE, N. C.<sup>2</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

bruno.luan.mello@usp.br

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

<sup>2</sup>York University

<sup>3</sup>Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais - CNPEM

Utilization of the carbon stored in the globally abundant crop residues for energy generation seems a promising solution to reduce our dependency on fossil fuels. (1) In nature, such as in compost habitats, microbial communities efficiently degrade the available plant biomass using a set of synergistic enzymes. (1) To assess the metabolic functions employed by those consortia in this process, metagenomics and metatranscriptomics sequencing have recently been used. (2) However, the deconstruction of lignocellulose is still a challenge for industry due to the recalcitrancy of the substrate to the available enzymes, raising the price of the produced biofuel. (3) Metatranscriptomics studies of these communities will unveil unknown enzymes and functions that might help improve industrial lignocellulosic conversion. In this study, a microbial community from compost was grown in minimal media with sugarcane bagasse as sole carbon source. The substrate degradation was monitored and the metatranscriptome was assembled, annotated and target genes were selected and characterized. The results confirmed the ability of the community to degrade the substrate, which was accomplished by multiple taxa, with an unexpected growing participation of eukaryotes. The expression of genes from the assembled library revealed biotechnologically interesting activities. This report demonstrates the metabolic potential of lignocellulose-adapted consortia, opening up possibilities for further studies.

**Keywords:** Metatranscriptomics. Compost. Bioethanol.

#### Referências:

1 WANG, C. et al. Metagenomic analysis of microbial consortia enriched from compost: new insights into the role of Actinobacteria in lignocellulose decomposition. **Biotechnology for Biofuels**, v. 9, p. 22-1-22-17, 2016. doi: 10.1186/s13068-016-0440-2.

2 JIANG, Y. et al. Metatranscriptomic analysis of diverse microbial communities reveals core metabolic pathways and microbiome-specific functionality. **Microbiome**, v. 4, p. 2-1-2-18, 2016. doi: 10.1186/s40168-015-0146-x.

3 HESS, M. et al. Metagenomic discovery of biomass-degrading genes and genomes from cow rumen.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Science**, v. 331, n. 6016, p. 463-467, 2011.



## PG123

### DNA encapsulation for antisense gene therapy

MELO, C. C.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTI, V.<sup>1</sup>; CANCINO-BERNARDI, J.<sup>1</sup>

criscasonatomelo@gmail.com

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

Hereditary hemochromatosis is a metabolic disease that can be caused by several mutations in genes involved in iron metabolism; the C282Y mutation in the HFE gene is the most common. (1) The patients with hereditary hemochromatosis suffer from an iron overload, but to date, there is no treatment except by bleeding. (1) Two main techniques that decrease or even stop the translational process inside the cells using oligonucleotides can be addressed: antisense therapy and interference RNA. (2) Both use the complementarity of oligonucleotides to the desired messenger RNA to alter the protein expression. (2) These techniques differ in regard to the proteins involved in the process, while for interference RNA it is possible to see RISC machinery acting, for antisense oligonucleotides RNase H cleaves the duplex DNA-RNA (2), in this project we exploit the antisense oligonucleotides technology. The design and chemical changes in the oligonucleotides for antisense therapy are still not a right science and many of them might be tested. Another crucial point is the correct delivery, in this point; nanotechnology can help and act as a safe protection against DNases and RNases, and even to deliver the oligonucleotide in the right cells. (3) The first step of the project was the design of an antisense oligonucleotide to a specific green fluorescent protein (GFP) expressed in a transgenic NB4 cell line, to do this, the mRNA structure of the GFP was analyzed. To the purpose of the project, quaternized and despolymerized chitosan's nanoparticles has been used to create a versatile carrier to gene therapy. Those nanoparticles have been characterized by zeta potential, dynamic light scattering, UV-vis absorption, FTIR, and microscopy. Cytotoxicity tests will be done in transgenic NB4 and normal NB4 cell lines. The next step will be applying these vehicles to guide the antisense oligonucleotide to treat hereditary hemochromatosis. The expectations are that with the development of both technologies will be possible to provide new treatments for some diseases as cancer or metabolic diseases.

**Keywords:** Antisense gene therapy. Hemochromatosis. Chitosan nanoparticles.

#### Referências:

- 1 PIETRANGELO, A. Hereditary hemochromatosis: pathogenesis, diagnosis, and treatment . **Gastroenterology**, v. 139, n. 2, p. 393-408, 2010. doi: 10.1053/j.gastro.2010.06.013.
- 2 ACHENBACH, T. V. et al. Oligonucleotide-based knockdown technologies: antisense versus RNA interference. **ChemBioChem**, v. 4, n. 10, p. 928-935, 2003. doi: 10.1002/cbic.200300708.
- 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. doi: 10.3389/fphar.2014.00077.



## PG124

# Automontagem de filamentos de septinas estudada por microscopia eletrônica.

MENDONÇA, D. C.<sup>1</sup>; PORTUGAL, R. V.<sup>2</sup>; CASSAGO, A.<sup>2</sup>; ARAÚJO, A. P. U.<sup>1</sup>; GARRATT, R. C.<sup>1</sup>

deborah.mendonca@usp.br

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

<sup>2</sup>LNNano - CNPEM

Septinas são GTPases do citoesqueleto e estão envolvidas em uma série de processos intracelulares, como divisão celular, tráfico de vesículas, excitose, entre outros.(1) Essas proteínas já foram identificadas em vários eucariotos superiores, mas estão ausentes em plantas. Mudanças em seus níveis de expressão são associadas com algumas patologias em eucariotos, como cânceres e doenças neurológicas.(1) Porém, há ainda muitas informações sobre tais moléculas ainda não esclarecidas, como seu papel na hidrólise de GTP e seu mecanismo de ação. Um outro aspecto interessante a ser estudado, cujo mecanismo ainda é pouco entendido, é a capacidade das septinas de se polimerizar na forma de hetero-oligômeros, resultando em filamentos que subsequentemente se organizam em estruturas de mais alta ordem.(2) Assim, este projeto objetiva análises de complexos de septinas ainda não estudados em termos estruturais, através da técnica de microscopia eletrônica de transmissão com análises de partícula única. Há 13 septinas em humanos, classificadas em quatro grupos quanto à similaridade em relação à região carboxi-terminal.(2) O complexo SEPT2-SEPT6-SEPT7 foi o melhor caracterizado, com uma estrutura cristalina resolvida à 4 Å(1). Segundo às regras de Kinoshita, as septinas desse complexo modelo poderiam ser substituídas por outras pertencentes ao mesmo grupo.(3) Como ponto de partida, o alvo principal para os ensaios de microscopia será o complexo formado pelas septinas 5, 6 e 7, a fim de esclarecer como as septinas se localizam e interagem na montagem do heterofilamento. Esse complexo foi escolhido inicialmente por conter resultados prévios de microscopia eletrônica de transmissão e conter um protocolo de purificação estabelecido. O propósito deste projeto está em estudar o arranjo dos hetero-oligômeros de septinas e validar as regras estabelecidas por Kinoshita no que diz respeito à substituição dentro do complexo SEPT2-SEPT6-SEPT7. Os resultados deste trabalho contribuirão para o avanço no entendimento dos heterocomplexos de septinas e de como essas proteínas interagem entre si nesse arranjo.

**Palavras-chave:** Septinas. Microscopia eletrônica de transmissão. Hetero-complexos.

### Referências:

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

2 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews**, v. 13, p. 183-194, 2012. doi: 10.1038/nrm3284.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 KINOSHITA, M. Assembly of mammalian septins. **Journal of Biochemistry**, v. 134, n. 4, p. 491-496, 2003.



## PG125

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

MENEZES, L. P.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>1</sup>

leon.menezes@usp.br

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

Uma das aplicações de destaque da técnica de Ressonância Magnética é seu emprego no meio clínico, permitindo a realização de diagnósticos não invasivos. Isso é possível, por exemplo, através de imagens (*Magnetic Resonance Imaging*, ou *MRI*) ou da quantificação de metabólitos localizados na região de interesse (*Magnetic Resonance Spectroscopy*, ou *MRS*). Dentre as formas de se aperfeiçoar a técnica, existe a busca por qualidade e confiabilidade do sinal coletado, que está sujeito a fontes diversas de ruído. Embora existam muito estudos para lidar com o ruído de origem instrumental, temos na espectroscopia *in vivo* uma fonte adicional de ruído, proveniente da própria amostra, seja devido a processos fisiológicos ou mesmo a sua movimentação durante o exame. Este tipo de ruído atua na porção inicial do sinal coletado (*Free Induction Decay*, ou *FID*), com alta relação sinal-ruído (*Signal Noise Ratio*, ou *SNR*), dificultando que sua presença seja reconhecida. Para sua detecção, uma abordagem recentemente utilizada foi a análise dos momentos da distribuição gerada pelo ruído e comparação com o esperado por uma distribuição normal, como forma de garantia da confiabilidade do sinal. (1) Com o objetivo de reduzir a interferência desse ruído de origem biológica, implementamos neste trabalho um filtro baseado em transformadas wavelet, seguindo resultados prévios na área de espectroscopia. (2) Os parâmetros empregados no filtro estão em fase de otimização, no entanto ele já apresenta uma alta performance em comparação a outros filtros. Estes resultados indicam que o método desenvolvido pode ser uma alternativa promissora para a remoção de ruído e melhoria da qualidade do sinal na espectroscopia *in vivo*.

**Palavras-chave:** Espectroscopia por ressonância magnética. Processamento de sinais. 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. et al. Signal de-noising in magnetic resonance spectroscopy using wavelet transforms. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 14, n. 6, p. 388-401, 2002.



## PG126

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

MIGLORIA, A.<sup>1</sup>; MENDES, T. C. R.<sup>1</sup>

alexandre.migloria@usp.br

<sup>1</sup>Instituto 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. (1) 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). (2) 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, 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. This allows us generate a number of typical configurations for the system at a given temperature. (3) We compare the traditional Metropolis algorithm and the more recent worm algorithm, which comes from a high-temperature expansion of the partition function.

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

### Referências:

- 1 GRIFFITHS, D. S. **Introduction to elementary particles**. Weinheim: Wiley-VCH, 2008. 454 p.
- 2 SALINAS, S. R. A. **Introdução a física estatística**. 2. ed. São Paulo: EDUSP, 1999. 464 p.
- 3 GIORDANO, N. J.; NAKANISHI, H. **Computational physics**. 2nd ed. Upper Saddle River: Pearson, 2006. 544 p.



## PG127

# Measuring the influence of the laser pulse width on nonlinear refractive index of organic solvents by nonlinear ellipse rotation

MIGUEZ, M. L.<sup>1</sup>; MISOGUTI, L.<sup>1</sup>

malumiguez@gmail.com

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

The nonlinear refractive index of materials can be from different third-order nonlinear processes such as pure electronic (instantaneous) and other slow nuclear contributions (noninstantaneous), for example. In general, organic solvents present both, instantaneous and noninstantaneous nonlinearities, which need to be discriminated to be corrected characterized. In order to distinguish different noninstantaneous nonlinearities, time resolved pump-probe techniques can be employed. (1) Different mechanisms have distinct response times. Also, depending of the pulse width the effective refractive nonlinearity as well changes. Here we investigate how the magnitudes of different organic solvents change when the pulse width changes in the femtosecond (fs) and picoseconds (ps) range. We have used a newly self-referenced nonlinear ellipse rotation (NER) method (2- 3) to measure precisely the nonlinearity as a function of pulse width. Measuring simultaneously a reference sample, silica, which pursues only pure electronic nonlinearity, we can extract the evolution of the solvent nonlinearity as pulse width increases. For long pulses, the nonlinear effects increase due to contribution of the slow nonlinearities. Several organic solvents such as CS<sub>2</sub>, acetone, methanol and chloroform were characterized with NER measurements. To measure liquids using this NER method, we use a silica cuvette filled with the liquid as sample. In this case, using short focal length it is possible to determine simultaneously the liquids and silica nonlinearities in a single scan and single beam for different pulse width. As we know, silica is one of the most popular material to state the pure electronic refractive nonlinearity ( $n_2 = 2,5 \times 10^{-16} \text{cm}^2/\text{W}$ ), which is considered constant in a wide range of pulse width. Using a commercial fs Ti:sapphire laser ( $\lambda = 800 \text{ nm}$ , 1 kHz, 60 fs, Dragon, K&M Labs) and its pulse compressor the pulse width could be changed in a good temporal range spanning from 60 fs up to 2 ps. All organic solvents used here have contribution of electronic and slow orientational nonlinear refractive indices, which this last grow as the pulse width increase. These results agree with other results observed in the literature (1). It is worth to mention that even without using any complicated time resolved method; we were able to infer the response time and magnitude of two types of nonlinearities indices of refraction in several organic solvents.

**Keywords:** Nonlinear rotation. Z-scan. Organic solvents.

### Referências:

1 REICHERT, M. et al. Temporal, spectral, and polarization dependence of the nonlinear optical response of carbon disulfide. **Optica**, v. 1, n. 6, p. 436-445, 2014.

2 MIGUEZ, M. L. et al. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied**





SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Physics B**, v. 120, n. 4, p. 653-658, 2015.

3 MIGUEZ, M. L. et al. Accurate measurement of nonlinear ellipse rotation using a phase-sensitive method. **Optics Express**, v. 22, n. 21, p. 25530-25538, 2014.



## PG128

# Electron detection with the AMS-02 experiment

MIKUNI, V. M.<sup>1</sup>; VECCHI, M.<sup>1</sup>

vinicius.mikuni@gmail.com

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

The Alpha Magnetic Spectrometer (AMS-02) is a high-energy particle physics detector operational on the International Space Station (ISS) since May 2011. Since its launch, the AMS-02 provided scientists a large amount of data whose precision was never before achieved, opening a new path for the study of cosmic rays. The first published results of AMS-02 show tension with the current understanding of the cosmic ray theory, particularly for the high energetic part. (1) These tensions are directly linked to many fundamental questions like the dark matter nature, the cosmic ray origin and their propagation in the galaxy. An extended measurement of the lepton flux with a high precision particle physics detector such AMS-02 would allow the understanding of the cosmic ray theory to reach new frontiers. Extrapolation to high energies can introduce systematics in the absolute energy scale, due to both software and hardware issues. From the software point of view, the leakage correction must be taken into account, and this has been shown to have negligible impact on the results, up to the TeV region. From the hardware point of view, the PMT linearity and saturation above 500 GeV should be properly taken into account. A conservative estimation of about 5% was considered in past publications for energies between 290 GeV and 1 TeV. This project propose to work on a better estimation of this uncertainty by evaluating the linearity of the PMT last amplification stage.

**Keywords:** Cosmic ray. AMS-02. Electrons.

### Referências:

1 AGUILAR, M. et al.. Electron and positron fluxes in primary cosmic rays measured with the Alpha Magnetic Spectrometer on the International Space Station. **Physical Review Letters**, v. 113, n. 12, p. 121102, 2014. doi: 10.1103/PhysRevLett.113.121102.



## PG129

# Descelularização de traqueia suína utilizando equipamento multifuncional

MION, W.<sup>1</sup>; SOUZA, A. V. G.<sup>2</sup>; MORRETI, T. A.<sup>1</sup>; DEFFUNE, E.<sup>2</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

wonermion@yahoo.com.br

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

<sup>2</sup>Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho- UNESP - Botucatu - SP

O transplante de traqueia continua sendo um desafio para comunidade científica. Problemas traqueais e estenoses oriundos de anomalias congênitas, processos traumáticos, câncer e infecção continuam sendo um grande problema para medicina. (1) Apesar dos avanços nas técnicas cirúrgicas e desenvolvimento de produtos substitutivos para traqueias humanas. O uso de traqueias humanas descelularizadas e recelularizadas com células autólogas envolve um processo com múltiplas etapas complexas de alto custo e grande demanda de tempo, o qual muitas vezes é escasso pela condição clínica do paciente. (2) Além disto, inexistente na literatura, critérios bem estabelecidos de controle da qualidade da traqueia descelularizada, para validá-la para uso em transplantes. O avanço recente da engenharia de tecidos na pesquisa traqueal permite vislumbrar novas perspectivas para a reconstrução das vias aéreas. (3) Diante desse cenário este trabalho propôs a elaboração de equipamento multifuncional para realização completa do processo de descelularização de traqueias, envolvendo processos físicos, mecânicos, químicos e fotônica que podem garantir um scaffold com padrões de qualidade reprodutíveis quanto as características mecânicas, biocompatibilidades e físico-químicas para futura semeadura de células e implante.

**Palavras-chave:** Decelularização. Traqueias. Multifuncional.

### Referências:

1 LOTT, D. G. What is the future of 'organ transplantation' in the head and neck?. **Current Opinion in Otolaryngology and Head and Neck Surgery**, v. 22, n. 5, p. 429-435, 2014. doi: 10.1097/MOO.0000000000000087.

2 BAIGUERA, S. et al. Tissue engineered human tracheas for in vivo implantation. **Biomaterials**, v. 31, n. 34, p. 8931-8938, 2010. doi: 10.1016/j.biomaterials.2010.08.005.

3 HAYKAL, S. et al. Advances in tracheal reconstruction. **Plastic and Reconstructive Surgery**, v. 2, n. 7, p. e178-1-e178-11, 2014. doi: 10.1097/GOX.0000000000000097.



## PG130

# Caracterização do RNA de vírus ZYMV por ressonância de superfície plasmons

MIRANDA, M. M. P.<sup>1</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>

messiampm@usp.br

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

Atualmente sensores ópticos com base na transmissão extraordinária da luz utilizando a tecnologia de onda evanescente, são amplamente utilizados para estudos direcionados da interação DNA-DNA; DNA-RNA; sequenciamento do código genético e hibridização de nucleotídeos, além da identificação de cepas virais. (1) A onda evanescente é uma onda eletromagnética gerada no momento que há reflexão interna total dentro de uma superfície sensora, que pode ser um metal nobre, ou um polímero adequadamente tratado. Uma onda evanescente penetra a interface óptica dentro do meio de reflexão a uma distância de aproximadamente 300 nm da superfície incidente e posteriormente decai exponencialmente. (2) Dentro dessa perspectiva, a espectrometria de Ressonância de Plasma de Superfície (SPR do inglês Plasmon Resonance Surface) é uma técnica que associa interação de ondas eletromagnéticas com os elétrons livres na condição de acoplamento entre o campo externo e os elétrons livres na superfície de uma camada fina de ouro resultado em polaritons. Assim se verifica a propriedades de uma camada de biomoléculas aderida na superfície da nano partícula de ouro (NP) pela mudança do índice de refração devido quantidade de luz absorvida ou refletida pela superfície plasmônica. A SPR é utilizada por uma série de estudos como cinéticas de adsorção e desorção, interações proteína com DNA, DNA-DNA, RNA-RNA, sequenciamento de nucleotídeos, e identificação de ácidos nucleicos. O uso de espectrometria de SPR como elemento de detecção dos biossensores de DNA, sobretudo se realiza com a imobilização do ácido nucleico sobre a superfície da camada metálica por adsorção direta, ou por um acoplamento indireto através de uma matriz de carboxi-metil-dextrana, por uma ponte avelina ligada à biotina, formando uma camada hidrofílica que aumenta a sensibilidade da SPR. A luminescência opticamente estimulada (OSL do inglês Optically Stimulated Luminescence) propicia a detecção do DNA, na superfície das NPs, através da variação do comprimento de onda dos nucleotídeos em relação à NP, essas variações são consideradas no estudo da sequência específica dos nucleotídeos do DNA, atribuindo resposta ressonante de cada base seu comprimento de onda. (1-2) O presente trabalho propõe a preparação de monocamadas de oligonucleotídeos organizadas sobre a superfície de NPs das sequências dos primers (ZY-1), (ZY-2) e (ZY-3) do vírus ZYMV. Que serão caracterizados por RT-PCR anteriormente, para caracterizar a sequência genética específica de RNA do vírus ZYMV extraído de curcubitáceas, para o reconhecimento do fito vírus através de seu material genético. Os resultados obtidos pela técnica SPR, serão comparados com resultados previamente obtidos por RT-PCR.

**Palavras-chave:** Plasmons. Nanopartículas. Ressonância.

### Referências:

1 SILVA, J. J. B. **Desenvolvimento de biossensores eletroquímico e piezométrico de DNA para**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**diagnósticos clínicos.** 2004. 95 p. Tese (Doutorado em Ciências Biológicas) - Centro de Ciências Biológicas, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2004.

2 WANG S. et al. Label-free imaging, detection, and mass measurement of single viruses by surface plasmon resonance. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 107, n. 37, p. 16028-16032, 2010. doi: 10.1073/pnas.1005264107.



## PG131

# Proposta de execução rápida para obter correlações entre $T_1$ e $T_2$ em ressonância magnética nuclear

MONTRAZI, E. T.<sup>1</sup>; LUCAS-OLIVEIRA, E.<sup>1</sup>; ARAUJO-FERREIRA, A. G.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>1</sup>

elton.montrazi@usp.br

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

As análises dos tempos de relaxação longitudinal ( $T_1$ ) e transversal ( $T_2$ ) em Ressonância Magnética Nuclear (RMN), assim como suas correlações multidimensionais, trazem informações de espécies moleculares e de suas dinâmicas, informações relevantes, por exemplo, para a exploração de óleo e gás. (1) Normalmente os mapas bidimensionais de correlação  $T_1$ - $T_2$  são obtidos dos experimentos chamados *Inversion-Recovery-CPMG* ou *Saturation-Recovery-CPMG*. A correlação entre  $T_2$ - $T_2$  obtidas do experimento  $T_2$ - $T_2$  Exchange contém informações de trocas entre sítios de  $T_2$  distintos. (2) Na sua versão original, o experimento  $T_2$ - $T_2$  Exchange, corresponde a um experimento tridimensional que consome muito tempo para ser realizado, inviabilizando o uso em perfilagem de poços petrolíferos. Recentemente, nosso grupo propôs uma versão bidimensional para o experimento, o  $T_2$ -Filtered  $T_2$ - $T_2$  Exchange, reduzindo significativamente o tempo necessário para a execução do experimento. (3) Assim como a versão 3D do  $T_2$ - $T_2$  Exchange, a 2D necessita de uma ciclagem de fase especial. Neste contexto, estamos propondo a execução simultânea dos experimentos  $T_2$ -Filtered  $T_2$ - $T_2$  Exchange e *Saturation-Recovery-CPMG*, adquirindo os sinais separados e empregando a ciclagem de fases distintas. A fim de validar a proposta, uma cerâmica de alumina foi saturada com água e, então, estudado os núcleos de hidrogênios. A cerâmica foi manufaturada pelo método de prensagem a seco com adição de agentes porogêncios e sinterização, o que resulta em uma amostra com três distribuições de tamanhos de poros distintos, os quais foram caracterizados via porosimetria por intrusão de mercúrio e imagens por microscópio eletrônico de varredura. (3) Em um campo de 2 teslas, frequência de 85 MHz para os núcleos  $^1\text{H}$ , foram obtidos os mapas  $T_1$ - $T_2$  para o *Inversion-Recovery-CPMG*, o *Saturation-Recovery-CPMG* e para os vários filtros do  $T_2$ -Filtered  $T_2$ - $T_2$  Exchange. O estudo comparativo entre os mapas  $T_1$ - $T_2$  obtidos permitiu asseverar que, a partir do experimento  $T_2$ -Filtered  $T_2$ - $T_2$  Exchange, também é possível obter simultaneamente o sinal *Saturation-Recovery-CPMG*. Portanto, a nova sequência  $T_2$ -Filtered  $T_2$ - $T_2$  Exchange proposta já mais rápida que a versão original, também possui a vantagem de obter o mapa  $T_1$ - $T_2$  simultaneamente, torna o método uma ferramenta com potencial para aplicação em *well-logging*.

**Palavras-chave:** NMR. Relaxation. Exchange.

### Referências:

1 SONG, Y.-Q. et al.  $T_1$ - $T_2$  correlation spectra obtained using a fast two-dimensional laplace inversion. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 154, n. 2, p. 261-268, 2002. doi: 10.1006/jmre.2001.2474.

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



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

164502-1-164502-11, 2009. doi: 10.1063/1.3245866.

3 D'EURYDICE, M. N. et al.  $T_2$ -filtered  $T_2$ - $T_2$  exchange NMR. **The Journal of Chemical Physics**, v. 144, n. 20, p. 204201-1-204201-10, 2016. doi: 10.1063/1.4951712.



## PG132

# Produção e estudos estruturais de heterocomplexos de Septinas

MORAIS, S. T. B.<sup>1</sup>; ARAUJO, A. P. U.<sup>1</sup>

sinarateixeira@yahoo.com.br

<sup>1</sup>Instituto 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*. Tais proteínas apresentam, cada uma, identidade com um dos quatro grupos de septinas descritos em mamíferos. (2) No andamento desse projeto, as proteínas foram expressas e sua interação na forma de um heterocomplexo foi observada por co-purificação, sendo confirmada a presença das quatro septinas neste complexo utilizando Espectroscopia de Massas. Ensaios preliminares de Microscopia Eletrônica de Transmissão permitiram observar a formação de um filamento, de aproximadamente 34nm, formado pelo heterocomplexo produzido in vitro, indicando sua organização como um octâmero. Uma vez que este organismo apresenta somente uma septina representante de cada grupo e tendo observado a formação de filamento, é possível que tais proteínas possam se organizar de forma similar à observada em humanos e outros organismos (1, 3), mas num único heterocomplexo. Novos estudos para analisar a posição dessas proteínas no filamento serão realizados e análises bioquímicas dessas proteínas isoladas para a determinação de sua atividade GTPásica ainda estão em andamento. Ainda, visando a caracterização estrutural das subunidades, estão sendo realizados ensaios de Dicroísmo Circular para determinação da estabilidade estrutural e ensaios de cristalização visando estudos estruturais comparativos com outras septinas.

**Palavras-chave:** Septina. Heterocomplexo. *Ciona intestinalis*.

### 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 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.

3 FIELD, C. M. et al. A purified *Drosophila* septin complex forms filaments and exhibits GTPase activity





SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

. **Journal of Cell Biology**, v. 133, n. 3, p. 605 - 616, 1996.

## PG133

# Reversão temporal na linguagem operacional da mecânica quântica

MORAZOTTI, N. A. C.<sup>1</sup>; NAPOLITANO, R. J.<sup>1</sup>

nicolas.morazotti@usp.br

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

A simetria de reversão temporal em mecânica quântica tem sido, há muito, alvo de controvérsias, pois as probabilidades de transição, a partir da regra de Born, não se aplicam. Para resolver este problema (1), utilizamos como ferramenta as teorias probabilístico operacionais (OPT). (2) Neste *framework*, é importante notar que estados e efeitos para um mesmo sistema  $A$  pertencem a espaços distintos, denotados por  $\text{St}^A$  e  $\text{Eff}^A$ , respectivamente. Desta forma, uma dada operação de simetria  $S^A$ , sobre o sistema físico  $A$ , atua sobre o produto  $S^A : \text{St}^A \times \text{Eff}^A \rightarrow \text{St}^A \times \text{Eff}^A$ . Essas transformações podem tanto levar estados em estados e efeitos em efeitos, nomeadas de tipo I, como mapear estados em efeitos e efeitos em estados, nomeadas de tipo II. Até então, a reversão temporal para a mecânica quântica usual era dada pelo Teorema de Wigner. Basicamente, se  $U$  é uma transformação atuando em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , ela pode ser unitária e linear ou antiunitária e anti-linear. Se admitirmos que a evolução temporal deve ocorrer segundo a equação de Schrödinger, a partir de um Hamiltoniano de espectro de energias positivas, uma vez que a reversão temporal é antiunitária, os estados retroditivos avançariam para trás no tempo com um espectro de energias negativas. Contudo, a evolução temporal é unitária e a energia não deveria alterar sob reversão temporal. Essa inconsistência ocorre pois o teorema de Wigner não distingue estados de efeitos. Perceba que  $U$  nunca é capaz de levar um efeito em um estado e um estado em um efeito. Então, todas as transformações que o teorema de Wigner abrange são do tipo I. No formalismo apresentado, entretanto, a reversão temporal é uma transformação do tipo II. Essa busca pela reversão temporal motiva-se num futuro estudo sobre Teoria de Colisões Quânticas, em que se deseja tratá-las de forma geral, utilizando a formulação de estados e efeitos. No entanto, colisões de pacotes de onda se dão em um espaço de Hilbert de dimensão infinita, e será necessário truncá-los. Para fazê-lo, é necessário expandí-los em uma base de pacotes de onda estacionários normalizados, constituídos de estados contínuos exatos não normalizáveis. (3) O que será feito para tratar um contínuo é dividi-lo em intervalos não sobrepostos - ou seja, discretizados. Restringimos o espectro do Hamiltoniano até algum valor máximo  $E_{max}$  (que embora finito, é grande o suficiente para garantir a convergência para a solução exata do problema em questão) e dividimos o intervalo  $[0, E_{max}]$  em um número finito de intervalos. Os objetivos do projeto são: aprender a deduzir a mecânica quântica a partir da linguagem operacional, com conceitos de estado e efeito; investigar como a informação quântica pode se propagar para frente e para trás no tempo; dar os primeiros passos sobre como aplicar estes entendimentos no caso contínuo e contextualizar as transformações de simetria dentro de possibilidades experimentais atuais.

**Palavras-chave:** Mecânica quântica. Reversão temporal. Teoria de colisões quânticas.

**Referências:**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

- 1 ORESHKOV, O.; CERF, N. J. Operational formulation of time reversal in quantum theory. **Nature Physics**, v. 11, n. 10, p. 853-858, 2015. doi: 10.1038/nphys3414.
- 2 CHIRIBELLA, G.; D'ARIANO, G. M.; PERINOTTI, P. Information derivation of quantum theory. **Physical Review A**, v. 84, n. 1, p. 012311-1-012311-39, 2011. doi: 10.1103/PhysRevA.84.012311.
- 3 RUBTSOVA, O. A.; KUKULIN, V. I.; POMERANTSEV; V. N. Wave-packet continuum discretization for quantum scattering. **Annals of Physics**, v. 360, p. 613-654, 2015. doi: 10.1016/j.aop.2015.04.028.



## PG134

### Endocytosis of pulchellin in HeLa cells

MOREIRA, H. H. T.<sup>1</sup>; LOPES, J. L.<sup>1</sup>; SANDVIG, K.<sup>2</sup>; LINGELEM, A. B. D.<sup>2</sup>; ARAÚJO, A. P. U.<sup>1</sup>

helinetm@ursa.ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Institute for Cancer Research - ICR

Pulchellin is a type 2 ribosome inactivating protein, which consists of a toxic A-chain linked to a sugar binding B-chain. It is a heterodimeric toxin found in *Abrus pulchellus* seeds. (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. We also monitored both toxins reaching the Golgi complex in HeLa cells using PII and PIV labelled with alexafluor and Golgi markers antibody (Giantin) using confocal microscopy. HeLa cells were incubated with protein synthesis inhibitors, such as puromycin and cycloheximidine and glycosylation inhibitors such as tunicamycin, swainsonine, they were sensitized to Pulchellin, but to different extent 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 glycocomplexes and glycosphingolipids containing sialic acid to enter into the cells. In the same experiment using dynamin inhibitors (dynasore) both isoforms increased endocytosis rates, displaying a compensatory effect in dynamin independent endocytic pathway, which suggests that the pulchellin is internalized via clathrin dependent and independent mechanisms. Confocal images showed that PIV takes more time to reaching Golgi comparing with PII. Biophysical experiments such as isothermal titration calorimetry (ITC) and differential scanning calorimetry (DSC) using sialic acid and biomimetic membranes containing the ganglioside GM1 were performed to try validate the differences between PII and PIV cell entry mechanism.

**Keywords:** Pulchellin. Endocytosis. Cell transport.

#### Referências:

1 CASTILHO, P. V. et al. 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. doi: 10.1111/j.1742-4658.2008.06258.x.

2 SLOMINSKA WOJEWODZKA, M.; 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. doi: 10.3390/antib2020236.



## PG135

# Estudos moleculares de enzimas do fungo termofílico *Thielavia terrestris* cultivado em bagaço de cana e desenvolvimento deste como novo chassi de expressão de proteínas

MULINARI, E. J.<sup>1</sup>; SEGATO, F.<sup>2</sup>; MUNIZ, J. R. C.<sup>1</sup>

evandro.mulinari@usp.br

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

<sup>2</sup>Escola de Engenharia de Lorena - USP

O desenvolvimento de ferramentas ômicas de alto desempenho permitiu estabelecer interações genéticas, proteicas e metabólicas complexas de organismos. Através dessas estratégias, o estudo do secretoma do fungo termofílico *Thielavia terrestris* cultivado em em bagaço de cana *in natura*, bagaço de cana pré-tratado e polpa de celulose mostraram-se promissores, apontando para alta degradação de biomassa por processos enzimáticos hidrolíticos e oxidativos. A melhor relação de degradação por concentração proteica durante os onze dias de cultivo do microrganismo foi estabelecida como referência para análises por espectrometria de massas e mRNA-Seq, além de testes bioquímicos e identificação de monossacarídeos liberados pela ação das enzimas do coquetel. Com esses dados, através de ferramentas de bioinformática, será possível a identificação e seleção das enzimas e posteriores estudos moleculares, bioquímicos e estruturais das enzimas individualmente. (1) Também, com base na geração de grande quantidade de dados fornecida por essas ferramentas, intenta-se desenvolver o *T. terrestris* como chassi de expressão de proteínas. Essa abordagem fará uso de transformação mediada por *Agrobacterium tumefaciens* dos genes de interesse e também no knockout de genes que possibilitem a seleção dos transformantes positivos. (2) A otimização de promotores constitutivos e induzíveis irá se desenvolver durante o percurso de obtenção desse novo chassi, com a finalidade de obter um coquetel enzimático para uso industrial, além de proteínas de interesse biotecnológico.

**Palavras-chave:** Secretoma. Fungo filamentos termofílico. *Agrobacterium tumefaciens*.

### Referências:

- 1 BERKA, R. M. et al. Comparative genomic analysis of the thermophilic biomass-degrading fungi *Myceliophthora thermophila* and *Thielavia terrestris*. **Nature Biotechnology**, v. 29, n. 10, p. 922-927, 2011. doi: 10.1038/nbt.1976.
- 2 XU, J. et al. Development of genetic tools for *Myceliophthora thermophila*. **BMC Biotechnology**, v. 15, p. 35-1-35-10, 2015. doi: 10.1186/s12896-015-0165-5.



## PG136

# LiBELa: um método híbrido baseado na estrutura do ligante e receptor para docagem molecular

MUNIZ, H. S.<sup>1</sup>; NASCIMENTO, A. S.<sup>1</sup>

heloisa.muniz@usp.br

<sup>1</sup>Instituto 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 6, 03 a 07 de outubro 2016, 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.



## PG137

# Preference for short chain substrate by a *Bacillus licheniformis* carboxylesterase and its bases on structural inferences

NAKAMURA, A. M.<sup>1</sup>; GODOY, A.<sup>1</sup>; KADOWAKI, M. A. S.<sup>1</sup>; POLIKARPOV, I.<sup>1</sup>

aline.nakamura@ifsc.usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de Sao Carlos - USP

Esterases are biocatalysts widely used in industrial processes due to their versatility, whilst maintaining the regio- and enantioselectivity, furthermore they do not require cofactors and are stable in organic solvents. (1) Due to the constant search for better commercial enzymes, *Bacillus licheniformis* is a good prospecting source as well as being an organism of great interest to industry. Despite the relevance, there is no structural studies of carboxylesterases from this organism. Here we present a structure of BIEst1, a *B. licheniformis* carboxylesterase, and correlates structure features with substrate specificity. The 2.4 Å crystal structure revealed an alfa/beta hydrolase core and a smaller domain adjacent to the active site forming a substrate-binding pocket. BIEst1 presented optimal activity at pH 7.0 and 45°C, and a higher specific activity against p-nitrophenyl acetate, a two carbon chain substrate. Structural alignments with the homologous lipase bMGL enable some inferences about BIEst1 substrate preference. We suggest that the second domain forms a groove-like binding site open to solvent, with a hydrophilic pocket, turning energetically unfavorable binding of long chain substrates, unlike bMGL that has a typical amphiphilic lipase cap, constituting a hydrophobic pocket. These findings shed light on the structural details of the enzyme specificity, which might be relevant information for biotechnology applications.

**Keywords:** Alpha/beta hydrolase. Crystallography. Carboxylesterases.

### 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.





## PG138

# O processo da matematização da eletrostática no século XVIII: um estudo histórico-crítico

NARDI, L. M. C.<sup>1</sup>; SILVA, C. C.<sup>1</sup>

lucas.nardi@usp.br

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

Os gregos antigos já conheciam as propriedades do âmbar e da magnetita. O primeiro quando atritado atrai corpos leves, o último tem a propriedade de atrair ferro. O estudo sobre os fenômenos magnéticos se desenvolveram na Idade Média. No século VIII, Pierre Peregrinus de Maricourt já discutia a existência de polos magnéticos. (1) Os estudos sobre eletricidade se desenvolveram de forma mais significativa no século XVIII. São inúmeros os pesquisadores que se dedicaram ao tema tanto com ênfase em aspectos experimentais como, por exemplo, Francis Hauksbee (1660-1713) que inventou potentes geradores eletrostáticos. Na época, uma das teorias mais famosas era a do fluido elétrico (ou effluvia), que preenchia os espaços vazios dos materiais e seria responsável pelos fenômenos elétricos. Jean-Antoine Nollet (1700-1770) está entre os maiores defensores da existência de fluidos elétricos, tendo elaborado uma sofisticada teoria para explicar os fenômenos conhecidos na época. Neste momento histórico os estudiosos da época acreditavam na possibilidade de explicação para os fenômenos conhecidos dentro do escopo teórico até ali desenvolvido. (1-2) Em 1745 Pieter Van Musschenbroek (1692-1761) estudava um experimento de faíscas produzidas por água eletrizada em uma garrafa. Com a ajuda de Andreas Cunaeus (1743-1797) que, acidentalmente, sofreu um grande choque elétrico após manipular um frasco de vidro, inventando o que passou a ser conhecido como garrafa de Leyden. Este novo dispositivo intrigou os pesquisadores da época, pois desafiou o conhecimento teórico e experimental vigentes. Benjamin Franklin (1706-1790), até então um novato nos estudos sobre eletricidade, propôs uma nova explicação para o funcionamento da garrafa de Leyden baseando-se na existência de um único fluido elétrico e atmosferas elétricas. Os estudos teóricos de Franklin e Nollet utilizavam uma abordagem qualitativa sem preocupação com a construção de modelos matemáticos. (2) Os avanços experimentais no século XVII e XVIII somados à reestruturação da matemática utilizada na física, iniciada por Leonhard Euler (1707-1783), e as ideias newtonianas de ação à distância influenciaram os eletricitistas pós-Franklin. Entre eles, Franz Ulrich Theodor Aepinus (1724-1802) que teve um importante papel na matematização da eletrostática e na introdução da noção à distância nos fenômenos elétricos. (3) O objetivo deste trabalho é estudar as influências mútuas entre a física e a matemática no século XVIII através da abordagem histórica, evitando deturpar os textos antigos. Além de uma abordagem metodológica, não se restringindo à mera descrição do passado. Portanto, procuraremos discutir aquela ciência com os recursos filosóficos e metodológicos adequados. O aluno está cursando a disciplina de introdução à física atômica e molecular também, e está em seu primeiro semestre como doutorando.

**Palavras-chave:** História da ciência. Matematização da eletrostática. Franz Aepinus.

**Referências:**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

1 WHITTAKER, E. T. **A history of the theories of aether and electricity**: from the age of Descartes to the close of the nineteenth century. New York: Humanities Press, 1973. 735 p.

2 HEILBRON, J. L. **Electricity in the 17th and 18th centuries**: a study of early modern physics. Mineola: Dover, 1999. 606 p.

3 HOME, R. W. **Aepinus's essay on the theory of electricity and magnetism**: introductory monograph and notes. Princeton: Princeton University Press, 1979. 514 p.



## PG139

# Photophysical processes on biological tissues and photodynamic therapy using steady-state and time-resolved fluorescence techniques: diagnosis applications, dosimetry and photodegradation kinetics

NOGUEIRA, M. S.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

marcelosaitonogueira@gmail.com

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

The fluorescence spectroscopy and lifetime analysis in biological tissues has been presented as a technique of great potential for tissue characterization for diagnostic purposes. This potential is due to the main advantages of optical techniques based on fluorescence for diagnosis, which includes the possibility of evaluating the tissue metabolism in situ, without removal and processing of the biological sample, through a fast and non-invasive response. These techniques are widely used to extract biochemical information of biological tissues and cellular processes. They are divided into methods using steady-state and time-resolved fluorescence. The first one is specifically related to the chemical composition of targeted fluorophores (fluorescent molecules), while the second one is mainly associated to their microenvironment. By combining information of both methods, we may exploit more details about endogenous and exogenous fluorophores present in tissues. The main endogenous fluorophores targeted are NADH, NAD(P)H, FAD, collagen, elastin, lipopigments and porphyrins, which may be related to metabolic changes, aging and photoaging processes (1-3) and collagen glycation. Among the exogenous ones, photosensitizers and nanostructured materials for drug delivery are highlighted and play an important role on photodynamic therapy, photothermal therapy, and controlled release of drugs. The photodynamic therapy is based on photosensitizer molecules, which accumulate on cancerous tissues and, when activated by light with the appropriate wavelength, generate singlet oxygen that kills cells from diseased tissues or contaminated surfaces. By monitoring treatments' efficiency and stages of diseases with steady-state and time-resolved fluorescence spectroscopy, we may improve the success rate of these treatments, and the detection techniques currently used on diagnostics. To implement these techniques for clinical measurements, we need to take account the interferences due to processes involving the sample's scattering and absorption. Coefficients associated to these processes are challenging to be precisely measured on complex media such as biological tissue, due to their inhomogeneity, presence of aggregates, large variety of molecules, size of particles, and width of each layer of tissue. By using spectroscopy and imaging techniques, we aim to measure the optical properties of biological tissues, and to investigate effects of these properties on the detected signal and the diagnostic resolution of each technique. For this purpose, steady-state and time-resolved fluorescence measurements will be performed by using imaging devices, a portable system for single-point measurements, and a multifunctional confocal microscope. This study approaches measurements on phantoms simulating optical properties of biological tissues, clinical applications such as feasibility of livers for transplantation, detection of microorganisms on patients with onychomycosis and the relationship with the success of their treatments, removal of pigments after dental whitening, evaluation of the efficiency of photodynamic therapy, metabolic and oxygenation changes on biological tissues. In addition, various methods will be applied for the analysis of images, spectra, and decay curves.



These analyses may be useful to understand the optical processes in complex media, the efficiency of optical techniques for the diagnosis of diseases and monitoring of therapeutical procedures such as photodynamic therapy, and to establish the requirements for success on these treatments and diagnoses.

**Keywords:** Fluorescence. Clinical diagnosis and treatment. Optical properties.

**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 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.
- 3 PATALAY, R. **The clinical application of multispectral fluorescence lifetime imaging of human skin using multiphoton microscopy**. 2013. 261 p. PhD Thesis (Doctoral in Medicine) - Department of Medicine, Imperial College of London, London, 2013.



## PG140

# Caracterização epidemiológica molecular de MRSA de São Carlos incluem presença de resistência heterogênea

OKADO, J. B.<sup>1</sup>; UEMURA, E. R.<sup>1</sup>; BOGNI, S. C.<sup>1</sup>; CAMARGO, I. L. B. C.<sup>1</sup>

jessica.okado@gmail.com

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

*Staphylococcus aureus* são cocos Gram-positivos, que podem colonizar indivíduos descontínua ou permanentemente. Possuem alta capacidade de se tornar resistentes a todas as classes de antimicrobianos disponíveis, por aquisição de elementos genéticos móveis (MGEs, do inglês, *Mobile Genetic Elements*) ou mutações pontuais. *S. aureus* resistentes à meticilina (MRSA) são de especial importância, pois além de serem multirresistentes, estão entre os maiores causadores de infecções nosocomiais. (1-2) Os objetivos deste estudo foram estudar a prevalência de MRSA em um hospital de São Carlos - SP, bem como definir as linhagens presentes, os perfis de virulência e verificar a atividade de antimicrobianos que se apresentam como últimas alternativas de tratamento para infecções causadas por estas bactérias. Para tal, 49 amostras de *S. aureus* isoladas de sítios de infecção de pacientes internados no período de julho de 2011 a janeiro de 2012 foram submetidas a caracterização genotípica e fenotípica, incluindo: 1) tipagem de elemento *SCCmec*; 2) determinação do perfil de sensibilidade a daptomicina, tigeciclina, linezolida, teicoplanina, tetraciclina e vancomicina; 3) confirmação de presença de heterorresistência à daptomicina e vancomicina por análise de população; 4) caracterização de família de plasmídeos presentes; 5) capacidade de produção de biofilme; 6) determinação da presença de 22 genes de virulência; 7) análise de similaridade genética por macrorrestrição do DNA genômico seguida de eletroforese em gel de campos pulsados (PFGE) e 8) tipagem por sequenciamento de Multilocus (MLST). Excluindo-se duplicatas de mesmo paciente, 27 isolados do total de 34 (79,4%) foram identificados como MRSA. Os isolados foram separados em 3 pulsotipos, sendo que o pulsotipo A foi prevalente com 24 (88,7%) dos isolados. Este pulsotipo está relacionado com as linhagens ST105-*SCCmecII* e ST5-*SCCmecII* que se disseminaram entre os pacientes. ST5-*SCCmecII* é conhecida como clone Nova York-Japão e ST105-*SCCmecII* é seu variante de locus único, ambos disseminados internacionalmente e descritos em vários estudos como substitutos do Clone Endêmico Brasileiro. (3) Houve também a presença da linhagem ST8-*SCCmecIV*, relacionado com o clone USA300. Beta hemólise e presença simultânea de *seh/sei/sem/seo/sem/lukDE/hla/hlb/hlg* foram encontrados em 96,3% e 85% dos isolados, respectivamente. Nenhuma amostra foi considerada boa formadora de biofilme. Apesar de todos os isolados terem apresentado sensibilidade a todos os antibióticos testados por microdiluição, três isolados apresentaram populações heterogêneas à vancomicina e/ou daptomicina. SCMSC29 apresentou população heterogênea contendo resistência intermediária à vancomicina (hVISA). Os isolados SCMSC19, SCMSC29 e SCMSC35 apresentaram população com resistência heterogênea à daptomicina (hDRSA). SCMSC29 apresentou perfil preocupante, sendo hVISA e hDRSA, simultaneamente. A adoção de programas de vigilância e a cautela no uso destes antibióticos são importantes para que não haja seleção destes co-resistentes. Conclui-se, portanto, que neste hospital existem linhagens que são conhecidas e bem sucedidas em ambientes hospitalares no mundo todo com o agravante de apresentarem heterorresistência a antibióticos de escolha para o tratamento das infecções causadas por MRSA. A



aparência dos perfis de heterorresistência é um achado importante, pois podem ser a causa de falhas durante o tratamento.

**Palavras-chave:** MRSA. hVISA. hDRSA.

**Referências:**

- 1 CHAMBER, H. F.; DELEO, F. R. Waves of resistance: *Staphylococcus aureus* in the antibiotic era. **Nature Reviews Microbiology**, v. 7, p. 629-641, 2009. doi: 10.1038/nrmicro2200.
- 2 MALACHOWA, N.; DELEO, F. R. Mobile genetic elements of *Staphylococcus aureus*. **Cellular and Molecular Life Sciences**, v. 67, n. 18, p. 3057-3071, 2010. doi: 10.1007/s00018-010-0389-4.
- 3 DABUL, A. N. G.; CAMARGO, I. L. B. C. Molecular characterization of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* resistant to tigecycline and daptomycin isolated in a hospital in Brazil. **Epidemiology and Infection**, v. 142, n. 3, p. 479-483, 2013. doi: 10.1017/S0950268813001325.



## PG141

# Aproximantes de Padé e a série perturbativa da QCD em decaimentos $\tau \rightarrow (\text{hádrons}) + \nu_\tau$

OLIANI, F. H.<sup>1</sup>; BOITO, D. R.<sup>1</sup>

fabio.oliani@usp.br

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

No modelo padrão das interações fundamentais, a cromodinâmica quântica (QCD, do inglês *quantum chromodynamics*) é a teoria consolidada para explicar os fenômenos que envolvem interações fortes. A teoria é não abeliana e tem simetria de calibre  $SU(N_c)$ , onde  $N_c = 3$  é o número de cores. Os férmions nessa teoria são os quarks e a interação entre eles, denominada força forte, é intermediada pela troca de glúons. O caráter não abeliano da teoria faz com que glúons também tenham carga de cor e interajam entre si, trocando outros glúons. O fato da QCD ser não abeliana e o confinamento fazem com que o tratamento de vários processos seja muito complexo, ou até mesmo inviável. Mas alguns processos são mais limpos, que é o caso dos decaimentos do lépton  $\tau$  (1), por exemplo. O  $\tau$  é o único lépton com massa suficiente para decair em hádrons. Aliando a descrição teórica rigorosa do decaimento  $\tau \rightarrow (\text{hádrons}) + \nu_\tau$  aos dados experimentais para esse decaimento é possível extrair informação sobre vários aspectos da QCD, como, por exemplo, a constante de acoplamento  $\alpha_s$  da teoria. Atualmente, a principal fonte de incerteza teórica na determinação de  $\alpha_s$  através do decaimento do  $\tau$  é devido à prescrição quanto ao uso do grupo de renormalização para otimizar a série. Existem dois procedimentos conhecidos como *Fixed Order Perturbation Theory* (FOPT) e *Contour-Improved Perturbation Theory* (CIPT), o que gera uma incerteza de 10% no valor de  $\alpha_s$ . O objetivo principal do trabalho é extrair informação sobre a série perturbativa da QCD em ordens intermediárias e altas nos decaimentos  $\tau \rightarrow (\text{hádrons}) + \nu_\tau$  utilizando-se aproximantes de Padé, e assim contribuir para a solução desse problema. A série perturbativa, por ser uma série assintótica pode ser melhor entendida utilizando-se o método da transformada de Borel. Essa transformada leva a série de um plano  $\alpha_s$  para uma nova variável  $t$ , onde a série tem singularidades no eixo real (conhecidas, nesse contexto, como renormalons) e essas estão diretamente ligadas ao comportamento da série em ordens intermediárias e altas. Os aproximantes de Padé (2) podem ter um papel central nessa área. Esses aproximantes tem a habilidade de aproximar bem funções que apresentam pólos, além desse método ter a capacidade de prever termos de ordem superiores com bastante precisão. Utilizamos, como teste, o método na transformada de Borel da séries perturbativa obtida no limite de grande número de sabores,  $N_f$ . Neste limite, a série perturbativa é conhecida em todas as ordens. Tendo entendido o funcionamento do método, aplicamos o mesmo na transformada de Borel da QCD verdadeira (além de calcularmos as correções utilizando a prescrição FOPT). A previsão para o valor do quinto coeficiente da série perturbativa foi de  $c_5 = 540 \pm 130$  e do quinto coeficiente da expansão perturbativa FOPT foi de  $b_5 = 850 \pm 100$  onde a incerteza engloba os valores obtidos com diferentes Padés. Pretendemos ainda aplicar o método dos Aproximantes de Padé diretamente na séries em  $\alpha_s$ , para termos uma estimativa do erro, além de obter as correções utilizando a prescrição CIPT.

**Palavras-chave:** QCD. Grupo de renormalização. Aproximantes de Padé.



### Referências:

1 PICH, A. Precision tau physics. **Progress in Particle and Nuclear Physics**, v. 75, p. 41-85, 2014. doi: 10.1016/j.pnpnp.2013.11.002.

2 QUERALT, P. M. **Rational approximations in quantum chromodynamics**. 2009. 172p. Ph. D. Thesis (Philosophy) - Institut de Física d'Altes Energies (IFAE), Universitat Autònoma de Barcelona, Barcelona, Espanha, 2009.





## PG142

### Hamiltoniano não linear na teoria do laser

OLIVEIRA NETO, F.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

foliveiraneto@usp.br

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

Tem-se como intuito desse projeto a construção e o desenvolvimento de um Hamiltoniano não linear, cuja interação entre radiação-matéria dependa do número de fótons que residem dentro da cavidade do laser. Esse tipo de Hamiltoniano vem sendo estudado (1-2) há algum tempo em diversas áreas, e seus resultados são promissores em seus respectivos ramos. O Hamiltoniano de Jaynes Cummings (3) é tradicionalmente conhecido por descrever a interação radiação-matéria, e através de uma modificação efetuada no mesmo, criando um Hamiltoniano não-linear em termos dos operadores de criação e aniquilação, 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 para o desenvolvimento e análise dos resultados obtidos, como o fator Q de Mandel, juntamente com aplicações de Hamiltonianos não lineares, necessários para o entendimento do projeto. Finalmente, discute-se as consequências da nova distribuição; suas semelhanças e suas diferenças em relação à tradicional, focando nos papéis dos parâmetros do laser.

**Palavras-chave:** Óptica quântica. Hamiltoniano não linear. Teoria do laser.

#### Referências:

- 1 RODRIGUEZ-LARA, B. An intensity-dependent quantum Rabi model: spectrum, SUSY partner and optical simulation. **Journal of the Optical Society of America**, v. 31, n. 7, p. 1719-1722, 2014. doi: 10.1364/JOSAB.31.001719.
- 2 CARDINOMA, D. A. et al. Quantum collapses and revivals in a nonlinear Jaynes-Cummings model. **Physical Review A**, v. 43, n. 7, p. 3710-3723, 1991. doi: 10.1103/PhysRevA.43.3710.
- 3 JAYNES, E. T.; CUMMINGS, F. W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. **Proceedings of the IEEE**, v. 51, n. 1, p. 89 - 109, 1963. doi: 10.1109/PROC.1963.1664.



## PG143

# Descoberta e planejamento de novos agroquímicos para o combate da escaldadura das folhas

OLIVEIRA, A. A.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

andrewalberttt@hotmail.com

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

*Xanthomonas albilineans* (Ashby) Dowson é causadora de uma das principais doenças encontradas em culturas de cana-de-açúcar: a escaldadura das folhas. 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 escaldadura das folhas têm sido negligenciados devido a dificuldades no diagnóstico, uma vez que os sintomas se assemelham a outras fitodoenças (e.g., raquitismo das soqueiras). Não há no mercado qualquer produto, químico ou biológico, que controle esta bactéria. Portanto, esse grave panorama torna urgente o desenvolvimento de novas alternativas para o controle da escaldadura das folhas. Para tanto, foram traçadas estratégias para a descoberta e desenvolvimento de novas moléculas bioativas através da Triagem biológica, Química Medicinal e Biologia Estrutural. São realizados ensaios fenotípicos de inibição para determinação de compostos ativos frente à cultura de *Xanthomonas albilineans*. Em outra vertente, selecionamos três alvos moleculares baseados em duas vias essenciais para o organismo: i. via dos folatos e ii. síntese de albicidina. As enzimas diidrofolato redutase (*XaDHFR*) e diidropteroato sintase (*XaDHPS*) estão relacionadas à produção do tetrahydrofolato, enquanto a enzima benzoato coenzima A ligase (*XaBCL*) ligada ao fator de virulência. Protocolos semelhantes de clonagem, expressão e purificação foram desenvolvidos para os alvos. *XaDHFR* e *XaBCL* encontram-se em fase final de purificação e expressão solúvel, respectivamente. Para a enzima *XaDHPS* avanços significativos foram obtidos, dentre eles destaca-se: i. purificação; ii. cristalização; iii. coleta de dados iv. resolução da estrutura 3D inédita (na forma apo e em complexo com ácido 4-aminobenzóico ou diidropteroato) e v. identificação de ligantes. 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:** Cana-de-açúcar. *Xanthomonas albilineans*. Escaldadura.

### Referências:

1 MENSÍ, I. et al. 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.



## PG144

### Evaluation of coaxial fundus camera

OLIVEIRA, A. O.<sup>1</sup>; MATOS, L.<sup>1</sup>; CASTRO NETO, J. C.<sup>1</sup>

a.orlandi.o@gmail.com

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

Retinography is a test that allows the diagnosis of many diseases, such as glaucoma and diabetic retinopathy, which are the leading cause of blindness in the world. (1) Such diagnosis are made based on images obtained using a fundus camera, which simultaneously illuminates and images the fundus of the eye. (2) In order to avoid reflections of the illumination system on the cornea, a ring of light is focused on the pupil of the eye and the fundus is imaged across the central area of the pupil. (3) Although the optical design of the current equipment is sophisticated and produces high resolution and reflection free images, it demands a complex alignment due to the high number of off-axis components. To simplify the equipment, we substituted the complex illumination system by a ring of Surface Mounted Device (SMD) Light Emitting Diodes (LEDs) assembled coaxially to the imaging system. Results show no change concerning the uniformity of the illumination on fundus in comparison with the traditional system. As the ring of SMD LEDs presents the same dimensions of the ring of light previously produced on the holed mirror, no vignette in the image was observed. To ensure the image of the new equipment presents enough resolution for screening purposes, we measured the Modulation Transfer Function (MTF) of the optical system, resulting in a polychromatic MTF of 0.35 lp/mm. Therefore, replacing the traditional illumination system by a ring of SMD LEDs in a fundus camera showed to be a valid advance in the optical design of the fundus camera. Besides the advantage of making the system completely coaxial, easing the alignment of the optical components, we drastically reduced the production cost of the equipment without losing both image quality and illumination uniformity.

**Keywords:** Coaxial design. Fundus camera. Illumination system.

#### Referências:

- 1 PIZZARELLO, L. D. The dimensions of the problem of eye disease among the elderly. **Ophthalmology**, v. 94, n. 9, p. 1191-1195, 1987.
- 2 BERNARDES, R.; SERRANHO, P.; LOBO, C. Digital ocular fundus imaging: a review. **Ophthalmologica**, v. 226, n. 4, p. 161-181, 2011.
- 3 KEELER, R.; SINGH, A. D.; DUA, H. S. Reflecting on reflections: Gullstrand's large reflex-free ophthalmoscope. **British Journal of Ophthalmology**, v. 94, n. 7, p. 826, 2010.



## PG145

# Photonic decontamination of circulating fluids

OLIVEIRA, B. P.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

b.p.oliveira@ifsc.usp.br

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

Technological development has greatly evolved in the last 10 years, producing new materials and instrumentations to be applied in many vital areas like health and food. Such areas are of great interest around the world. However the interface human-microbiology is a problem because the procedure for decontamination and control of the microorganism do not increase likewise the development of technology. (1) Currently, there are some method for this control, a thermal and a chemical mechanisms. The heat treatments have limitations in industrial processes and non-thermal resistance materials. Chemical treatments have a problem with application in food process because it create an environment problem and accumulation in food. Alternatively to thermal and chemical control, light can be direct applied in the manufacture processes in food industry or medical procedures for example transplants, hemodialysis.(2) Both situations have the same problem, which is the contact of the circulating fluids and non-control microbiological agents with instruments that could lead to hazardous contamination. In this research, the focus is the constructions of equipment addressing such problems for the health and food industries. Decontamination processes will be carried out by applying PDT and UV-light in order to reduce microbiological agents to the security range.

**Keywords:** UV. PDT. Decontamination.

### Referências:

1 CANUTO, O. Aprendizado tecnológico na industrialização tardia. **Economia e Sociedade**, v. 2, n. 1, p. 171-189, 2016.

2 BHATIA, S. N.; INGBER, D. E . Microfluidic organs-on-chips. **Nature Biotechnology**, v. 32, n. 8, p. 761 - 772, 2014. doi: 10.1038/nbt.2989.



## PG146

# Desenvolvimento de ferramenta computacional para obtenção automatizada de dados em testes comportamentais do tipo campo aberto

OLIVEIRA, I. M.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>1</sup>

bodelha@gmail.com

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

Testes comportamentais em animais são utilizados quando se deseja observar comparativamente alguma característica, tal como o comportamento sob efeito de algum fármaco e sem administração do mesmo (1), identificação de perfis comportamentais de linhagens diferentes dentro de uma mesma espécie (2), ou ainda de uma mesma linhagem, em condições ambientais ou fisiológicas (3) diferentes. Pela simplicidade de construção, o Teste de Campo Aberto (Open Field Test) foi o escolhido para o projeto. O teste consiste em se soltar o roedor, ou algum outro animal de pequeno porte, numa caixa com quadrantes desenhados e observar, dentre outros fatores, a distância percorrida, velocidade média, número de elevações, número e duração de "paradas", frequência nos quadrantes centrais, número de coprólitos. Normalmente os testes tem duração de 5 a 15 minutos, e são gravados em vídeo, para posteriormente serem assistidos e analisados, um a um, pelo pesquisador que fará anotações dos elementos citados. Esse processo, não só é extremamente pouco eficiente como altamente passível de falhas. O objetivo central do projeto consiste em desenvolver uma ferramenta computacional que faça, a partir dos vídeos obtidos em testes de Campo Aberto, uma extração automatizada de dados quantitativos que subsidiarão a análise qualitativa final do comportamento animal. Para tanto, utilizar-se-á estratégias típicas no campo da Visão Computacional, como segmentação por intensidade ou textura, para se detectar a posição do animal na caixa, bem como de extração de características que podem permitir a classificação dos comportamentos possíveis. Atualmente tem-se investigado variações de técnicas e de parâmetros dentro das mesmas, visando robustez, fundamental à aplicabilidade da ferramenta.

**Palavras-chave:** Visão computacional. Open field test. Teste comportamental.

### 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.
- 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.
- 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.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

269-275, 2000.



## PG147

# Estudos no diamante para aplicações em tecnologias quânticas

ONCEBAY SEGURA, C.<sup>1</sup>; ALMEIDA, J. M. P.<sup>1</sup>; MUNIZ, S. R.<sup>1</sup>

charlieoncebay@ifsc.usp.br

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

Imperfeições na rede cristalina do diamante são comuns. Tais defeitos cristalográficos podem ser o resultado de irregularidades na rede cristalina devido à substituição de impurezas introduzidas durante ou após o crescimento do diamante. Nesse contexto os centros de vacância de nitrogênio (NV) chamam 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. Esse sistema permite o controle do spin de um único elétron dentro do cristal, utilizando uma combinação de técnicas ópticas e de ressonância magnética, que permitem o estudo e a manipulação de estados quânticos, em condições típicas de laboratório, sem requisitos muito especiais. Isso abre a possibilidade explorarmos ideias e aplicações únicas de informação e computação quântica mesmo na temperatura ambiente. Outro grande potencial desse tipo de tecnologia é a produção de nano-sensores ultrassensíveis, atualmente bastante explorados em áreas de interface com a biologia e a medicina, por exemplo no estudo de biomoléculas e estruturas celulares. (1-2) Nos últimos anos, os centros NV em diamantes também têm surgido como uma plataforma promissora para circuitos fotônicos integrados ou circuitos óptico integrados, combinando propriedades não lineares, como o índice de refração não linear, com as excelentes propriedades térmicas do diamante (alta condutividade térmica, por exemplo), que permite a manipulação a potências altas. Uma aplicação interessante situa-se no campo da óptica quântica: não linearidade de diamantes pode permitir a translação de frequência, para o intervalo de comprimento da onda de telecomunicações por exemplo. (3) No presente trabalho abordamos a obtenção e a caracterização dos centros NVs em diamante, observando suas propriedades ópticas lineares, não lineares ( $n_2$ ) e espectroscópicas para otimizar seu uso em magnetometria e outras aplicações tecnológicas. 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 elaboraremos um plano para explorar esses sistemas como sensores de fenômenos magnéticos em micro e nano escala.

**Palavras-chave:** Centro Nitrogênio-Vacância . ODMR. Diamante.

### Referências:

- 1 MAZE, J. R. et al. Nanoscale magnetic sensing with an individual electronic spin in diamond. **Nature**, v. 455, n. 7213, p. 644-647, 2008. doi: 10.1038/nature07279.
- 2 ACOSTA, V. M. et al. Temperature dependence of the nitrogen-vacancy magnetic resonance in diamond. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 7, p. 070801, 2010. doi: 10.1103/PhysRevLett.104.070801.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 HAUSMANN, B. J. M. et al. Diamond nonlinear photonics. **Nature Photonics**, v. 8, n. 5, p. 369-374, 2014. doi: 10.1038/nphoton.2014.72.





## PG148

# Desenvolvimento de uma matriz dérmica a base de celulose visando o crescimento celular direcional

ONO, B. A.<sup>1</sup>; SHARMA, R. I.<sup>2</sup>; CAMPANA-FILHO, S. P.<sup>3</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

bruno.ono@usp.br

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

<sup>2</sup>University of Bath

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

A pele é o maior órgão do ser humano e possui a função de proteger contra microorganismos, toxinas e desidratação. Quando esta barreira natural é exposta por causa de queimaduras e lesões crônicas, o corpo através do sistema imune inicia o reparo da região exposta, enviando macrófagos e diversos sinais, como fatores de crescimento epidermais (VEGF e FGF) para que ocorra a angiogênese e reepitelização do local. (1) Lesões crônicas e perdas substanciais do tecido necessitam de um tratamento especial, pois são locais propícios para infecção, o implante autógeno é um dos métodos utilizado com pouco risco de rejeição do corpo, porém quando há uma grande área afetada este procedimento deixa de ser viável e as matrizes dérmicas são uma opção comum para o tratamento de feridas. Existem diferentes tipos de matrizes dérmicas no mercado, a maioria delas é comercializada por empresas internacionais, o que eleva os custos de tratamento. Estes produtos apresentam diversas composições, como colágeno, fibrina, ácido hialurônico entre outros. (2) A celulose é um material que vem sendo estudado para o crescimento celular devido suas propriedades de biocompatibilidade, biodegradabilidade e forma parecida com a matriz extra-celular. (3) O presente projeto visa desenvolver e caracterizar matrizes de celulose porosas, onde serão depositados filmes de quitosana com grupamentos que favoreçam o crescimento celular e também seu direcionamento através de trilhas. O projeto esta sendo realizado em colaboração com pesquisadores da Universidade de Bath e do Instituto de Química de São Carlos.

**Palavras-chave:** Matrizes dérmicas. Celulose. Quitosana.

### Referências:

1 KULAR, J. K.; BASU, S.; SHARMA, R. I. The extracellular matrix: structure, composition, age-related differences, tools for analysis and applications for tissue engineering. **Journal of Tissue Engineering** , v. 5, p. 1 - 17, 2014. doi: 10.1177/2041731414557112 .

2 SHEVCHENKO, R. V. ; JAMES, S. L.; JAMES, S. E. A review of tissue-engineered skin bioconstructs available for skin reconstruction. **Journal of Royal Society Interface**, v. 7, n. 43, p. 229-258, 2010. doi: 10.1098/rsif.2009.0403.

3 SAINITYAA, R. et al. Scaffolds containing chitosan/carboxymethyl cellulose/mesoporouswollastonite



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

for bone tissue engineering. **International Journal of Biological Macromolecules**, v. 80, p. 481 - 488, 2015. doi: 10.1016/j.ijbiomac.2015.07.016.



## PG149

# Contrast optimization in multiphase arterial spin labeling

PASCHOAL, A. M.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>2</sup>; LEONI, R. F.<sup>1</sup>

ampaschoal@gmail.com

<sup>1</sup>Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras - USP - Ribeirão Preto

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Magnetic resonance imaging has been one of the major methods to acquire images for medical diagnoses, specially, for obtaining brain images. An important kind of image used to evaluate several cerebrovascular diseases is the perfusion weighted imaging (1), from which the Cerebral Blood Flow (CBF) can be estimated. Although the gold standard method using magnetic resonance to measure CBF has high efficiency, it needs an injection of intravascular contrast agent, like gadolinium. This contrast agent application can be a lot invasive for the patient, in extremes cases resulting in allergic reactions. Therefore, a method that has been studied recently and is very promising is the Arterial Spin Labeling (ASL).(2) In ASL, a radiofrequency (RF) pulse is applied to tag the hydrogen atoms of the arterial blood, changing the direction of its magnetization in a certain angle, called flip angle, so that this tagged blood is used as an endogenous tracer to measure CBF. This method has the major advantage of being completely non-invasive for the patient and it allows to numerically quantify CBF values. In general, a pair of images is acquired, one image after tagging, and another one at control condition, when no tagging is applied. To better evaluate the blood flow and its perfusion in the brain tissue, it is necessary to acquire images at different instants of time after tagging, since the arterial transit time varies from person to person, and it is necessary to follow the flow. Acquiring images at different times is called multiphase acquisition (3), and the conventional ASL multiphase method loses the contrast over the phases. This loss of contrast is essentially critical in cases of patients with some neurovascular diseases, especially those associated with arterial blood transit time delay, for example carotid stenosis. In that cases, evaluate the late phases is critical to see if the blood is not being perfused or if it just has a longer transit time. In the present study, a method was implemented to optimize the contrast in late phases of ASL multiphase acquisition through a modulation in the flip angle. To show the efficiency of the proposed method, it was compared with the conventional method in a group of young healthy subjects. After validation, it was applied in patients with carotid stenosis.

**Keywords:** Arterial spin labeling. Cerebral blood flow. Magnetic resonance imaging.

### 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.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 BUXTON, R.B. et al. A general kinetic model for quantitative perfusion imaging with arterial spin labeling. **Magnetic Resonance in Medicine**, v. 40, n. 3, p. 383-96, 1998.



## PG150

# Continuous production of $Rb_2$ molecules in the ground vibrational state in an optical dipole trap

PASSAGEM, H. F.<sup>1</sup>; SILVA, P. C. V.<sup>1</sup>; RODRIGUEZ, R. C.<sup>1</sup>; MARCASSA, L. G.<sup>1</sup>

henry.passagem@gmail.com

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

The manipulation of atomic or molecular quantum dynamics and the availability of robust and selective methods of executing population transfer in quantum systems are essential for a variety of fields. We could mention precision spectroscopy, quantum computing, control of molecular dynamics and chemical reactions. In our experiment we produce the  $Rb_2$  molecules through photoassociation process which is performed in a rubidium magneto optical trap (MOT). (1) However, photoassociation from cold atoms lead to the production of vibrationally excited molecules. Our challenge is therefore to prepare and control molecules in the ground vibrational state. Here, we report our recent experimental setup that allow us to prepare continuously a high density ensemble of  $Rb_2$  molecules in the  $v=0$  vibrational level of the electronic ground state trapped in an optical dipole trap. Our laser system is constituted of a fiber laser amplifier that is seeded with a broadband super luminescent diode (SLD) centered in 1060 nm and with a linewidth of 20 nm. The amplified light reach 50W of power that is focused into the rubidium MOT volume with a waist of 40  $\mu\text{m}$ . The broadband source optically pump the vibrationally excited molecules, transferring them to the ground vibrational state. (2) The main idea is that the vibrationally excited molecules absorbs photons from the broadband light and for spontaneous emission they decay to lower vibrational levels until they be completely transferred to the vibrational ground state ( $v=0$ ). Finally, to probe the existence of vibrational ground state ( $v=0$ ) molecules we performed ionization spectroscopy. The results had shown that our system can successfully produce and trap ultracold molecules with a simpler technique compared with others research groups. In the future, this technique will be applied to polar dimers.

**Keywords:** Cold atoms. Cold molecules. Dipole trap.

### Referências:

1 PASSAGEM, H. F. **Fotoassociação de curto alcance em átomos de rubídio**. 2016. 76p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

2 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 .



## PG151

# Estudos estruturais e funcionais de novos ligantes sintéticos do receptor PPAR $\gamma$

PAULA, K.<sup>1</sup>; NASCIMENTO, A. S.<sup>1</sup>

karinadepaulausp@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto 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. Eles agem através da regulação da transcrição de genes-alvo respondendo a sinais metabólicos, hormônios e outras moléculas regulatórias integrando muitas vias de sinalização. (1) 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 tiazolidinonas (TZDs), e os fibratos. (1-2) O PPAR $\gamma$  é o alvo molecular dos TZDs, empregados no tratamento do diabetes do tipo II. (1-3) Com os achados recentes relatando efeitos colaterais severos associados ao uso dos fármacos desta classe e à importância do PPAR $\gamma$  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 $\gamma$  (bases estruturais) e a proposição de moléculas mais seguras e mais eficazes para a manutenção de níveis euglicêmicos. Para isso foram realizadas a expressão, purificação, seguidas de ensaios cristalográficos e biofísicos com a espectroscopia de fluorescência em cinco ligantes selecionados a partir de etapas de docking realizados anteriormente pelo nosso grupo. Dentre estes ligantes destacam-se os fármacos metotrexato (MTX) e ácido fólico (AF), pois os trabalhos de docking indicam que o MTX e o AF possam ser agonistas totais do PPAR $\gamma$ . Até o momento os cristais obtidos para estes dois ligantes se mostraram com baixa qualidade, a maioria com difração a resoluções de 3Å ou mais baixas. Porém um conjunto de dados do MTX está sendo refinado e os dados ainda são inconclusivos. 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 $\gamma$  com um modo de ligação diferente de agonistas totais como a rosiglitazona. Os protocolos de fluorescência em diferentes experimentos independentes estão sendo realizados para a obtenção do K<sub>d</sub> do ANS pelo PPAR $\gamma$  com valores reprodutíveis muito próximos ao que estão na literatura. Este conjunto de informações estruturais apresentados neste trabalho para o PPAR  $\gamma$  é de grande avaliação 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  $\gamma$  semelhante ao que já se encontram no mercado porém com efeitos colaterais reduzidos.

**Palavras-chave:** Receptores nucleares. Receptor ativador da proliferação de peroxissomos. Agonista parcial.

**Referências:**



- 1 WANG, L. et.al. Natural product agonists of peroxisome proliferator-activated receptor gamma (PPAR $\gamma$ ): a review. **Biochemical Pharmacology**, v. 92, n. 1, p. 73-89, 2014.
- 2 AHMADIAN, M. et al.. PPARgama signaling and metabolism: the good, the bad and the future. **Nature Medicine — Review** , v. 99, p. 557-566, 2013. doi: 10.1038/nm.3159.
- 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.



## PG152

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

PERES, L. M. C.<sup>1</sup>; GALANTE, D.<sup>2</sup>

lara.maldanis@lnls.br

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

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Microfossils are the most ancient morphological life traces on earth. Their affinity, otherwise, are quite disputed because of the difficulty on identifying biogenic structures in very processed and billion years old rocks. (1) A deep understanding and the ability of characterize the first known life forms of the planet are a crucial step for the systematic search of life in other places within the universe. X-ray imaging techniques are a non-destructive and largely applied approach in fossil characterization, mainly through absorption and phase-contrast CTs. However, lens imaging techniques in the x-ray regime comes up against the limitation of the resolution, determined by the formula  $d > 0.61 \lambda / NA$  where NA is the numerical aperture of the lens and  $\lambda$  is the wavelength. Since it is impracticable to build very large optical elements, necessary for increasing resolution in this regime, lensless imaging techniques, or Coherent Diffraction Imaging (CDI) shows up as an alternative approach, which utilizes computational processing to recover the image from the sample diffraction patterns in the far-field. To resolve the phase-problem, the method of Ptychography has been applied in samples that are bigger than the nanometric-size and very coherent x-ray beam. (2) This approach is based in the multiple illumination through a superposed scanning of the sample, allowing extended areas to be sampled. 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 astrobiological and paleontological community through establishing a feasible methodology that could contribute to the biogenicity problem of the oldest presumed fossils of earth.

**Keywords:** Fossils. X-ray imaging. Tomography.

### Referências:

1 BRASIER, M. D. G. et al. Questioning the evidence for Earth's oldest fossils. **Nature**, v. 416, n. 6876, p. 76-81, 2002.

2 MIAO, J. I. et al. Beyond crystallography: diffractive imaging using coherent x-ray light sources. **Science**, v. 348, n. 6234, p. 530-535, 2015.





## PG153

# Dynamics of Kuramoto oscillators in complex networks

PERON, T. K. D'M.<sup>1</sup>; RODRIGUES, F. A.<sup>2</sup>

thomaskaue@gmail.com

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

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

Synchronization phenomena are ubiquitous in nature, science, society, and technology. Examples of oscillators are fireflies, lasers, neurons and heart cells. Among the many models proposed for a description of synchronization, the Kuramoto model is the most popular nowadays. It describes self-sustained phase oscillators rotating at heterogeneous intrinsic frequencies coupled through the sine of their phase differences. Since its original formulation 40 years ago, several variations, extensions and applications of the Kuramoto model have been documented in the literature. In parallel with the advances in the study of the traditional Kuramoto model, over almost the last two decades one has witnessed the rapid development of the new field of network science, which not only brought new insights into the characterization of real networks, but also introduced a new dimension in the study of dynamical systems. This interest in the interplay between structure and function of complex systems has thus triggered a myriad of works on the collective dynamics of Kuramoto oscillators coupled in heterogeneous topologies. (1) However, despite years of intense research, many important gaps remain to be filled. In this project, we tackle fundamental questions regarding the dynamics of phase oscillators in complex networks. Precisely, we investigate the influence of cycles of order three - a motif that is pervasive in the topology of real-world networks - showing, counterintuitively, that such a structural pattern has a weak influence in the onset of synchronization. (2) Furthermore, here we provide the first generalization to uncorrelated networks of the second-order Kuramoto model, a variant that is able to describe the dynamics of real power grid networks. (3) Finally, we also report the emergence of new intriguing patterns of synchronization if the coupling between the oscillators is asymmetric. Specifically, we show that under repulsive interactions and different perceptions of the mean-field, oscillators are able to split into clusters in the phase space and exhibit travelling waves, i.e. states in which the oscillators settle on new rhythm different from their own. (1) Our results deepen the understanding of the relationship between structure and dynamics in networks and could be potentially relevant to comprehend the emergence of collective rhythms in, for instance, neuronal and power grid networks.

**Keywords:** Synchronization. Complex networks. Dynamical systems.

### Referências:

1 RODRIGUES, F. A. et al. The Kuramoto model in complex networks. **Physics Reports**, v. 610, p. 1-98, 2016. doi: 10.1016/j.physrep.2015.10.008.

2 PERON, T. K. D'M.; RODRIGUES, F. A.; KURTHS, J. Synchronization in random clustered networks.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**Physical Review E**, v. 87, n. 3, p. 032807-1-032807-6, 2013. doi: 10.1103/PhysRevE.87.032807.

3 Ji, P. et al. Cluster explosive synchronization in complex networks. **Physical Review Letters**, v. 110, n. 21, p. 218701-1-218701-5, 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.110.218701.



## PG154

# Estudo da dinâmica, interação e internalização de Fotossensibilizador em biofilme e em cultura planctônica de *Streptococcus mutans* pré induzido por luz

PINTO JUNIOR, F. F.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

fabiojr@ifsc.usp.br

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

Dentre as mais de centenas de tipos de cânceres existentes, o câncer de pele não melanoma, só no Brasil, acometerá este ano de 2016 mais de 175.760 casos segundo o Instituto Nacional de Câncer (INCA). Frente ao desafio de combater esta doença a Terapia Fotodinâmica (PDT do inglês *Photodynamic Therapy*) tem se consolidado cada vez mais como um método eficaz, de relativo baixo custo e de fácil condução, aplicação e manutenção do tratamento de combate ao câncer. O PDT consiste basicamente na aplicação de um composto Fotossensibilizador (PS do inglês *Photosensitizer*) e de uma fonte de luz com um comprimento específico de onda, que ao irradiar as células que contém o PS o ativará e fará com que ocorra certas reações que darão origem ao oxigênio singleto.(1) Sendo este oxigênio uma forma altamente citotóxica para a célula dar-se à sua apoptose. Em vista disso, justifica-se o estudo detalhado e profundo da dinâmica, da interação e da internalização do PS induzido por luz. Na busca da obtenção de um coeficiente de difusão do PS em biofilme e em cultura planctônica este trabalho utilizar-se-á da microscopia confocal de fluorescência e das técnicas correlacionadas para que, em nível microscópico, se determine as doses ideais de luz e de PS entregues às células.(2) Estabelecendo assim, protocolos específicos para estudos futuros e uma maior compreensão dessa interação entre o PS e o organismo. Também analisar-se-á a variação do coeficiente de difusão no biofilme bacteriano em função da ação de materiais que o desconstroem como agentes surfactantes e o pH além de outros.

**Palavras-chave:** Microscopia confocal. *Streptococcus mutans*. Terapia fotodinâmica.

### Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Terapia fotodinâmica dermatológica:** programa TFD Brasil. São Carlos: Compacta Gráfica e Editora, 2015. 313 p.

2 WILSON, B.C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. 61-109, 2004.

## PG155

# Terapia fotodinâmica por absorção de 2-fótons para o tratamento do melanoma ocular

PIRES, L.<sup>1</sup>; KHATTAK, S.<sup>2</sup>; YUCEL, Y. H.<sup>2</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; WILSON, B. C.<sup>3</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

laylabtu@gmail.com

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

<sup>2</sup>Keenan Research Centre for Biomedical Science - St. Michael's Hospital - Toronto, Canada

<sup>3</sup>Princess Margaret Cancer Centre - University of Toronto, Toronto, Canada

A terapia fotodinâmica (TFD) é uma técnica baseada na interação da luz com um fotossensibilizador e oxigênio para induzir a morte celular. O melanoma ocular, por ser um tumor pigmentado, não apresenta boa resposta à TFD uma vez que a luz é absorvida na superfície do tumor, impedindo seu tratamento em profundidade. Neste estudo, pretende-se melhorar a eficiência da terapia fotodinâmica através do fenômeno de absorção de 2-fótons. Para isso, são utilizados lasers pulsados para excitar o fotossensibilizador em vez de luz contínua de baixa intensidade, utilizada no método convencional. Assim, as moléculas do fotossensibilizador absorvem 2-fótons com menor energia para ser excitadas para um estado equivalente a absorção de um fóton de maior energia. Isso permite o uso de comprimentos de onda maiores, aumentando a penetração da luz no tecido. (1) Ensaio *in vitro*: A TFD 2-fótons foi realizada em duas linhagens celulares de melanoma humano - G361 (melanótica) e C32 (amelanótica) utilizando como fotossensibilizador uma verteporfirina (Visudyne - Vancouver, Canada). As células foram tratadas em microscópio (Zeiss - LSM 710) com laser Chameleon emitindo em 865nm. O tratamento foi avaliado com o uso de marcadores fluorescentes baseados na permeabilidade da membrana celular de membrana (LIVE/DEAD - Life technologies) e sua quantificação foi realizada por meio de imagem da área irradiada utilizando o software ImageJ®. As células melanóticas (G361) mostraram-se mais susceptíveis à TFD 2-fótons do que as células amelanóticas (C32). Esse resultado discorda do esperado uma vez que a melanina é um composto anti-oxidante e sempre descrito como um fator desfavorável a TFD, uma vez que age impedindo o efeito oxidante da TFD na célula. Entretanto, alguns estudos sugerem que a melanina pode também ser um composto produtor de oxigênio singlete e assim, oxidante sob determinados regimes de iluminação. (2) Estudos adicionais para descrever a interação da TFD 2-fótons com a melanina celular estão sendo realizados como produção de oxigênio singlete pela melanina e transferência de energia entre a melanina e o fotossensibilizador. Ensaio *in vivo*: os tumores foram induzidos a partir da injeção de 1400 células B16F10 por uL em 5uL de PBS na conjuntiva de camundongos albino sob anestesia geral. Esse protocolo foi aprovado pelas Comissões de Ética em Experimentação Animal do Instituto de Câncer de Ontário (OCI) e do Hospital St. Michael's - Toronto/Canada. Os animais foram avaliados clinicamente e por meio de imagem fotoacústica diariamente a fim de obter informações sobre o desenvolvimento da lesão e alterações no próprio comportamento e saúde do animal. As imagens fotoacústicas foram realizadas no equipamento MSOT inVision 128, iThera Medical, que possibilita varrer todo o animal e detectar possíveis metástases. O ensaio piloto realizado em 10 animais mostrou que após única sessão de PDT 2-fótons foi possível eliminar o melanoma conjuntival sem dano aos tecidos adjacentes. Esses resultados



preliminares, *in vitro* e *in vivo*, mostram que a TFD 2-fótons pode vir a se tornar uma alternativa para o tratamento do melanoma conjuntival.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Melanoma conjuntival. Absorção de 2-fótons.

**Referências:**

1 KHURANA, M. et al. Quantitative in vitro demonstration of two-photon photodynamic therapy using photofrin and visudyne. **Photochemistry and Photobiology**, v. 83, n. 6, p. 1441-8, 2007. doi: 10.1111/j.1751-1097.2007.00185.x.

2 CHIARELLI-NETO, O. et al. Melanin photosensitization and the effect of visible light on epithelial cells. **Plos One**, v. 9, n. 11, p. e113266, 2014. doi: 10.1371/journal.pone.0113266.



## PG156

# PyMR - um framework para programação generalizada de sistemas de ressonância magnética

PIZETTA, D. C.<sup>1</sup>; SILVA, L. C. R. <sup>1</sup>; SOUZA, P. V. B. D.<sup>1</sup>; FALVO, M.<sup>1</sup>; COELHO, F. B.<sup>1</sup>; VIDOTO, E. L. G.<sup>1</sup>; MARTINS, M.<sup>1</sup>; TANNÚS, A.<sup>1</sup>

daniel.pizetta@usp.br

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

A Ressonância Magnética (RM) esteve sempre à frente das ferramentas de análise e diagnóstico por suas características não-invasiva e não-destrutiva do objeto em estudo. Recentes pesquisas em diversas áreas, como a de agronomia, estão trazendo tal tecnologia de forma mais acessível e portátil e que necessita de flexibilidade para que os pesquisadores possam adaptá-las às suas necessidades. (1) O objetivo deste projeto é a definição de um *framework* que auxilie a programação e gerenciamento dos equipamentos - criação de interface - que seja flexível e de fácil uso, o que não é encontrado nos sistemas comerciais. Agregados a isto, ferramentas que deem suporte ao *framework* para o ambiente de desenvolvimento Eclipse deverão ser geradas como *plug-ins*, oferecendo maior suporte e agilidade ao pesquisador. Dentro desta estrutura, o *framework* PyMR (2) oferece uma API generalizada para programação e configuração dos sistemas de RM, enquanto outra API derivada deste constitui o *back-end*, que se comunica em mais baixo nível com o hardware. Os *plug-ins* integrados ao Eclipse têm a função de auxiliar o programador com tarefas repetitivas ou que possam ser programadas, acelerando o processo de desenvolvimento. Todo o *framework* é suportado por técnicas atualizadas de programação que geram uma API capaz de ser integrada com outras ferramentas externas como simuladores e bibliotecas científicas. As versões preliminares já estão em uso nos sistemas de RM locais. O conjunto de *framework* e *plug-ins* mostra-se extremamente versátil e flexível, o que reflete o alto poder de geração de novas tecnologias ou novas aplicações para as já existentes.

**Palavras-chave:** Interface de programação de aplicação. Ambiente integrado de desenvolvimento. Sequência de pulsos.

### Referências:

1 COLNALGO, L. A. et al. Why is inline NMR rarely used as industrial sensor? challenges and opportunities. **Chemical Engineering & Technology**, v. 37, n. 2, p. 191-203, 2014. doi:doi:10.1002/ceat.201300380.

2 PIZETTA, D. C. **Biblioteca, API e IDE para o desenvolvimento de projetos de metodologias de ressonância magnética**. 2014. 98p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.



## PG157

# Utilização de espectros Raman com processamento computacional para identificação de minerais

QUEIROZ, A. A. A. E.<sup>1</sup>; ANDRADE, M. B.<sup>1</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

alfredo.queiroz@usp.br

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

A espectroscopia Raman estuda as vibrações moleculares associadas aos modos internos e de rede resultantes dos movimentos dos íons nos cristais. A técnica pode ser usada para a caracterização e identificação de minerais por ser sensível à estrutura cristalina e à composição química. A vantagem desta técnica espectroscópica no estudo de minerais é que requer pouca ou nenhuma preparação da amostra (1-2), facilitando a análise de amostras in situ, sem precisar de um procedimento experimental muito elaborado, como trituração para obtenção de pó ou a preparação de pastilhas. A interpretação dos dados obtidos pelo espectrômetro Raman é, na maioria das vezes complexa, o que dificulta a identificação de algumas características específicas para uma determinada espécie mineral. Com o intuito de acelerar o processo de identificação de uma amostra de mineral, no trabalho será utilizado um sistema embasado em Redes Neurais Artificiais para a classificação das espécies mineralógicas mediante a análise computacional de seus espectros. (3) Nesse caso, a rede neural artificial apresenta-se como uma aplicação de algoritmos exploratórios para se investigar um conjunto de dados de interesse mineralógico. Até onde se realizou o levantamento bibliográfico, não se tem conhecimento na literatura sobre a utilização de uma função de treinamento para uma rede neural do tipo retropropagação do erro (backpropagation) com o intuito de acelerar o processo de identificação de minerais por meio de espectros Raman. Nesse sentido o trabalho se desenvolverá na formação de uma base de dados com as amostras estudadas, compara-las com outras bases e, por meio de processamentos computacionais utilizando sistema baseado em redes neurais, a identificação de minerais.

**Palavras-chave:** Minerais. Identificação. Raman.

### Referências:

- 1 GRIFFITH, W. P. Raman spectroscopy of minerals. **Nature**, v. 224, p. 264-266, 1969. doi: 10.1038/224264a0.
- 2 SUTCLIFFE, B. T.; WOOLLEY, G. On the quantum theory of molecules. **Journal of Chemical Physics**, v. 137, p. 22A54, 2012. doi: 10.1063/1.4755287.
- 3 DUCH, W.; DIERCKSEN, G. H. F. Neural networks as tools to solve problems in physics and chemistry. **Computer Physics Communications**, v. 82, n. 2-3, p. 91-103, 1994. doi: 10.1016/0010-4655(94)90158-9.



## PG158

# Evaluation of Mad Soy II diagnosis in pelletized soybean leaves by macronutrient analysis obtained by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS)

RANULFI, A. C.<sup>1</sup>; SENESI, G. S.<sup>2</sup>; CAETANO, J. B.<sup>3</sup>; MEYER, M.<sup>4</sup>; MAGALHAES, A. B.<sup>5</sup>; VILLAS-BOAS, P. R.<sup>5</sup>; MILORI, D. M. B. P.<sup>5</sup>

aniranulfi@gmail.com

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

<sup>2</sup>Istituto di Nanotecnologia (NANOTEC) – PLASMI Lab. - CNR

<sup>3</sup>Departamento de Física - UFSCar

<sup>4</sup>Embrapa Soja - Londrina

<sup>5</sup>Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

Soybean and its derivatives are one of the most valuable and traded agricultural commodities worldwide. (1) From 2001 to 2005 a huge soybean cropland expansion occurred worldwide with planted area increase from 3 to 6 million ha and production increase by 85%, a third of which occurred by deforestation of the Brazilian Amazon forest where the soybean planted area increased three times. Thus, a unanimously recognized need is the development of new agricultural technologies that can render the production process more efficient and improve the yields so to respond to the demand of increasing soybean production worldwide with no further increase of the cropped areas. One of the causes of decreasing in Brazilian soybean production is associated with Mad Soy II, a recent and not well-known disease that affects soy plants. Unfortunately, no effective methods of early diagnoses and treatments are known. For these reasons, in the present work pelletized leaves from healthy and sick soybean plants of two varieties, from two different places of Brazilian Amazon region, were evaluated by laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) for their content of the three macro nutrients Ca, K and Mg. LIBS is a current analytical technique that uses an intense and short-pulsed focused laser to vaporize, atomize and excite the sample in a single step. (2) The relative simplicity of LIBS instrumentation and the minimal sample preparation required made it a valuable tool applied to agriculture, (3) in this case, to the nutritional investigation and disease diagnosis of plant samples. Atomic Absorption Spectrometry (AAS), a trustable analytical tool but laborious and time-consuming technique, was used as the reference technique. The Pearson coefficients obtained for the correlation between LIBS and AAS data were close to 0.80 for the three nutrients analyzed. Student t-test and Principal Component Analysis (PCA) applied to evaluate the LIBS data allowed to discern between healthy and sick plant leaves and identify the best spectra region for the discernment cited. A classification tool was also applied to the data (classification via regression (CVR) associated with Partial Least Square Regression (PLSR)) and yielded success rates higher than 80% in the differentiation between healthy and sick samples for the sets evaluated. This study demonstrates the possibility of using LIBS as a convenient analytical tool to discern between healthy and





Mad-Soy-II infected plants by analyzing the three macronutrient Ca, K and Mg and helping the producer to better and faster manage this disease in the field, increasing the production yield.

**Keywords:** Nutritional evaluation. Leaf diagnosis. Soybean.

**Referências:**

- 1 MASUDA, T.; GOLDSMITH, P. D. World soybean production: area harvested, yield, and long-term projections. **International Food and Agribusiness Management Review**, v. 12, n. 4, p. 143-162, 2009.
- 2 MUSAZZI, S.; PERINI, U. **Laser-induced breakdown spectroscopy: theory and applications**. Berlin: Springer , 2014. 565 p.
- 3 TREVIZAN, L. C. et al. Evaluation of laser induced breakdown spectroscopy for the determination of macronutrients in plant materials. **Spectrochimica Acta Part B**, v. 63, n. 10, p. 1151-1158, 2008. doi: 10.1016/j.sab.2008.08.005.



## PG159

# Otimização nos processos da formação e distribuição de PpIX no tratamento de câncer de pele por Terapia Fotodinâmica: dispositivos de aplicação intradérmica

REQUENA, M. B.<sup>1</sup>; VOLLET FILHO, J. D.<sup>1</sup>; RUSSIGNOLI, P. E.<sup>2</sup>; SALVIO, A. G.<sup>3</sup>; MENEZES, P. F. C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

michelle@ursa.ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Departamento de Medicina - UFSCar

<sup>3</sup>Fundação Hospital Amaral Carvalho - HAC

Para Terapia Fotodinâmica (TFD), a Protoporfirina IX (PpIX) é um fotossensibilizador (FS) endógeno bastante utilizado a partir da aplicação de precursores, como o ácido aminolevulínico (ALA) e aminolevulinato de metila (M-ALA). Entretanto, para que haja acúmulo suficiente de PpIX para a realização do tratamento de lesões epiteliais como o carcinoma basocelular (CBC), o intervalo droga-luz (IDL) do protocolo clínico convencional é de aproximadamente 180 minutos após a aplicação tópica do precursor.<sup>(1-2)</sup> Há diferentes dispositivos utilizados para facilitar a permeação dos precursores nas camadas da pele que têm demonstrado efetividade para diminuição do IDL. Porém, não há relatos na literatura de trabalhos que explorem a aplicação de TFD fazendo uso da disponibilização de precursores ou mesmo dos próprios FSs por estes dispositivos de entrega via intradérmica. Tendo em vista que a aplicação intradérmica pode possibilitar um menor IDL para os precursores da PpIX, a hipótese apresentada de neste projeto se fundamenta na ideia de que esta técnica pode ser uma ferramenta eficaz para o aperfeiçoamento da TFD no tratamento de lesões epiteliais, proporcionando ainda a disponibilização de precursores com maior penetração no tecido em relação à sua aplicação tópica convencional. Este projeto propõe, instrumentação, caracterização da técnica, além da aplicação de novas tecnologias em experimentos em animais e testes clínicos para verificar a produção de PpIX e análise do dano por TFD. Se comprovada a eficácia da aplicação e constatação de um menor IDL associada a maior profundidade de produção de PpIX, é possível a diminuição dos custos do tratamento e menor tempo de desconforto pode ser oferecido ao paciente, fazendo com a TFD seja uma opção de tratamento ainda mais favorável e aceita pela comunidade médica.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Intervalo droga-luz. Dispositivos de entrega intradérmica.

### 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. 1, n. 1, p. 22-26, 2014. doi: 10.1016/j.pdpdt.2013.11.001.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 BUZZÁ, H. H. et al. . Photodynamic therapy: progress toward a scientific and clinical network in Latin America. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy**, v. 13, p. 261-6, 2015. doi: 10.1016/j.pdpdt.2015.08.004.



## PG160

# Instabilities of fermionic, vectorial and tensorial fields in curved spacetimes.

RIBEIRO, C.<sup>1</sup>; VANZELLA, D.<sup>1</sup>

caiocesarribeiro@ifsc.usp.br

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

Recently, the effect of the *awaking vacuum*, where a well behaved gravitational fields can induce an exponential amplification of the vacuum energy density of a quantum field, have been extensively studied in the context of scalar fields. (1-2) In particular, the connection with the effect of *spontaneous scalarization* in astrophysical context of compact objects was established by demonstrating that the vacuum fluctuations of the quantum scalar field sow classical disturbances that evolve to a scalarized system configuration after suffering decoherence due to the gravitational interaction. (3) This PhD project aims to analyze the occurrence of instabilities of the same nature for fields associated with particles with nonzero spin, as the Dirac field and Weyl (spin 1/2), Maxwell and Proca (spin 1) and graviton (spin 2). Besides natural, such analysis is necessary to assess the extent of implications of these instabilities in realistic settings, since almost all fields known in nature have one of these spins (with the Higgs field possibly being the only exception).

**Keywords:** Awakening vacuum. Spontaneous scalarization. Particles with nonzero spin.

### Referências:

- 1 LIMA, W. C. C.; VANZELLA, D. A. T. Gravity-induced vacuum dominance. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 16, p. 161102, 2010. doi: 10.1103/PhysRevLett.104.161102.
- 2 LIMA, W. C. C.; MATSAS, G. E. A.; VANZELLA, D. A. T. Awakening the vacuum in relativistic stars. **Physical Review Letters**, v. 105, n. 15, p. 151102, 2010. doi: 10.1103/PhysRevLett.105.151102.
- 3 LANDULFO, A. G. S. et al. From quantum to classical instability in relativistic stars. **Physical Review D**, v. 91, n. 2, p. 024011, 2015. doi: 10.1103/PhysRevD.91.024011.



## PG161

# Conjugation of nanocapsules with tumor targets for therapeutic and diagnostic applications against cancer

RIBOVSKI, L.<sup>1</sup>; CANCINO-BERNARDI, J.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

laisrbovski@gmail.com

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

Biodegradable polymeric nanoparticles have found applications as carriers for the delivery of chemotherapy drugs to tumors. These nanoparticles allow a significant reduction in the quantity of drugs administered and, therefore, reduction of side effects. Although the drug-loaded nanoparticles offer important advantages, the efficient delivery and targeting of specific cancer cells, especially the circulating tumor cells (CTCs), still remains a challenge.(1) A new nanoparticle-based treatment is proposed to promote the active delivery of chemotherapy drug-loaded nanoparticles through cell-specific ligands related to lung cancer, more specifically, type II pulmonary epithelial cells. We aim to test three drugs with different physical-chemical properties, drugs A, B and C, as well three cell-specific ligands, *alpha*, *beta* and *gamma*. To determine the optimal number of drug molecules to be encapsulated, half maximal inhibitory concentration (IC<sub>50</sub>) of the free drugs was determined to the cell line through MTT cell proliferation assay. Nanoparticle synthesis protocols were previously established and have been optimized according to the encapsulation efficiency (EE), loading capacity (LC), stability and size, parameters obtained using high performance liquid chromatography (HPLC), spectroscopic techniques, dynamic light scattering (DLS), electronic and confocal microscopy and isothermal titration calorimetry (ITC).(2) Treatment efficacy and toxicity will be evaluated in healthy and lung cancer cells by flow cytometry, fluorescence and microscopy. Moreover, if the treatment shows promising results in vitro, 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. This study should deliver comparative results between a number of cell-specific ligands and chemotherapy drug-loaded nanoparticles, assisting the choice of more appropriate treatments for lung cancer.

**Keywords:** Nano-based drugs. Cancer immunology. Nanomedicine.

### Referências:

- 1 TORCHILIN, V. P.. Passive and active drug targeting: drug delivery to tumors as an example. In: SCHAFFER-KORTING, M. **Drug delivery**. Berlin, Heidelberg: Springer Verlag, 2010. p. 3-53
- 2 WILHELM, S. et al. Analysis of nanoparticle delivery to tumours. **Nature Reviews Materials**, v. 1, p. 16014, 2016. doi: 10.1038/natrevmats.2016.14.



## PG162

# Structural ordering and dielectric properties of $\text{Ba}_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ -based microwave ceramics

RODRIGUES, J. E. F. S.<sup>1</sup>; CASTRO, P. J.<sup>2</sup>; PIZANI, P. S.<sup>3</sup>; CORRER, W. R.<sup>1</sup>; HERNANDES, A. C.<sup>1</sup>

rodrigues.joaobelias@gmail.com

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

<sup>2</sup>Laboratório Associado de Plasma - INPE

<sup>3</sup>Departamento de Física - UFSCar

$\text{Ba}_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$  is a 1 : 2 ordered perovskite which presents a trigonal cell within the  $D_{3d}^3$  space group. This system can exchange between microwave dielectric resonator and proton-conductor by tailoring the ordering degree of the crystal structure. Dense ceramics of  $\text{Ba}_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$  were prepared by the solid-state reaction route, and their microwave dielectric features were evaluated as a function of the sintering time. From Raman spectroscopy, by using group-theory calculations, we were able to recognize the coexistence of the 1 : 1 and 1 : 2 ordering types in all samples, in which increasing the sintering time tends to reduce the 1 : 1 domain, leading to an enhancement of the unloaded quality factor. We concluded that this domain acts as a lattice vibration damping, consequently raising the dielectric loss at microwave frequencies. The best microwave dielectric parameters were determined in ceramics sintered at 1500 °C for 32 h:  $\epsilon = 43$ ;  $Q_u \times f_r = 15,752$  GHz;  $\tau_f = 278$  ppm. $^\circ\text{C}^{-1}$ . (1)

**Keywords:**  $\text{Ba}(\text{Ca}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ . 1:2 ordered perovskite. Cation ordering.

### Referências:

1 RODRIGUES, J. E. F. S. et al. Structural ordering and dielectric properties of  $\text{Ba}_3\text{CaNb}_2\text{O}_9$ -based microwave ceramics. **Ceramics International**, 2016. In press. doi: 10.1016/j.ceramint.2016.08.113.



## PG163

# Intensificação da penetração de medicamentos e formação de PpIX para terapia fotodinâmica

RODRIGUES, P. G. S.<sup>1</sup>; ROCHA, R. W.<sup>2</sup>; ESCOBAR, A.<sup>2</sup>; NARDI, A. B.<sup>2</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

phamilla@gmail.com

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

<sup>2</sup>Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP

A terapia fotodinâmica (TFD) é uma técnica não invasiva usada no tratamento de lesões de pele, como o cancer basocelular, queratose actínica, e doença de Bowen. Basicamente, a administração de um fotossensibilizador, a irradiação com luz adequada, e o oxigênio celular, combinados, geram a uma série de reações que provocam a morte do tecido. Contudo, o principal efeito colateral desta terapia é a fotossensibilidade prolongada ocasionada por administração de fotossensibilizadores sistêmicos.(1-2) Por outro lado, a via tópica não apresenta esta limitação, e o tratamento é realizado no local da lesão, através de pró-drogas. São disponíveis, e com vistas à aprovação no Brasil, dois agentes tópicos, o ALA e seu derivado Metil-ALA que são agentes indutores de PpIX, uma porfirina fotossensível. Sendo que o Metil proporciona maior facilidade em penetrar o tecido, porém, ALA é conhecido por produzir mais PpIX, e, estes fatores tem limitado a TFD tópica ao tratamento de lesões superficiais de pele. (3) Diante disso, técnicas físicas foram estudadas para permitir uma maior penetração do tópico no tecido, com distribuição homogênea, e com efetividade na produção de PpIX. Assim, este estudo visou analisar o papel das técnicas de tape stripping, injeção livre de agulhas e rolos de microagulhas na melhoria destes fatores. As avaliações foram feitas por espectroscopia de fluorescência, punches e imagens de fluorescência, usando o modelo porcino, in vivo, conhecido como o mais similar ao tecido de pele humana. Os resultados mostram que as técnicas de tape stripping, rolos de microagulhas e injeção livre de agulhas, tornam a produção de PpIX mais homogênea. Além disso, avaliações por punches mostram a relação de profundidade de entrega do creme entre as técnicas. Estes resultados indicam que a terapia tópica possa se estender à tratamentos de lesões mais profundas, ou, que seja utilizada em lesões superficiais com maior efetividade e menores taxas de recorrência quando associada à tais técnicas.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Técnicas de fluorescência. Punches.

### Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Novas técnicas ópticas para as áreas da saúde**. São Paulo: Livraria da Física, 2008. 239 p.

2 MOAN, J.; MA, L. W.; IANI, V. On the pharmacokinetics of topically applied 5-aminolevulinic acid and two of its esters. **International Journal of Cancer**, v. 92, n. 1, p. 139-143, 2001.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 JUZENIENE, A. et al. Topical application of 5-aminolaevulinic acid, methyl 5-aminolaevulinate and hexyl 5-aminolaevulinate on normal human skin. **British Journal of Dermatology**, v. 155, n. 4, p. 791-799, 2006.





## PG164

### Present of Brazilian Cesium fountain Br-CsF

RODRIGUEZ, A. D.<sup>1</sup>; BUENO, C.<sup>2</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; MAGALHÃES, D. V.<sup>2</sup>

andresro@ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Escola de Engenharia de São Carlos - USP

Currently, time and frequencies standards have major applications in the several fields such as research, technology, industry as well as services. Few countries around of world have the ability of development this technology. In South America today our center has developed an atomic Cesium fountain with aiming to accomplished time and frequencies standards. (1) We present in this work new progress of Brazilian Cesium fountain Br-CsF mainly the characterization of optical system where we obtained a magneto-optical trap (MOT) with  $n \sim 10^9$  atoms in loading time of  $t_l = 1.2s$  and with a temperature of  $T \sim 4\mu K$ . The atomic cloud was thrown upwards using the move molasses technique. On the flight the degeneracy of atoms is raise with c-field around of  $B \sim 100nT$ . In this region, the atomic cloud interacts with oscillatory magnetic field tuned in the transition of the ground state between  $F = 4, m_F = 0$  e  $F = 3, m_F = 0$  with value of  $9192611770Hz$  in two pass (up and down), Ramsey method. Finally the atoms that to make the clock transition are detected for technique TOF (time of flight). The great result of this new phase is the Ramsey fringe with good quality and her central oscillation has a FWHM of 1.5 Hz and the cycle time is 2 s. (2)

**Keywords:** Atomic fountain. Ramsey method. Cold atoms.

#### Referências:

1 MAGALHÃES, D. V. et al. Progress toward a Cs-133 fountain as frequency standard in Brazil. **Laser Physics**, v. 14, n. 2, p. 150-153, 2004.

2 BEBEACHIBULI, A. et al. Characterization of the main frequency shifts for the Brazilian 133Cs, atomic frequency standard. **Brazilian Journal of Physics**, v. 35, n. 4A, p. 1010-1015, 2005.



## PG165

# Monitoramento em tempo real de fotossensibilizadores em células e micro-organismos por meio de técnicas avançadas de microscopia confocal de fluorescência

ROMANO, R. A.<sup>1</sup>; PRATAVIEIRA, S.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

renan.romano@gmail.com

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

O monitoramento em tempo real da localização do fotossensibilizador em células é de interesse internacional na área de biofotônica, uma vez que o entendimento dessa interação possibilita aumento da eficiência da terapia fotodinâmica (PDT - acrônimo do inglês *Photodynamic Therapy*). Esta é uma técnica promissora no tratamento de doenças nas diversas áreas da medicina, tais como oncologia, dentística, oftálmica, entre outras. Apesar da PDT ter sido estudada por muitos anos, apenas recentemente a técnica vem sendo amplamente aceita e utilizada, isso se dá por conta de suas vantagens: seletividade (tratamento localizado), rápido e de baixo custo, quando comparada com as técnicas padrões de tratamento destas lesões. (1) Entretanto a eficácia da PDT ainda não é comparável aos tratamentos padrões, não sendo assim utilizada em larga escala em sistemas de saúde. (2) Visando melhorar a eficiência da PDT a presente proposta prevê, através da criação de métodos de rastreamento de moléculas, caracterizar os processos e interações entre os fotossensibilizadores e as células e a criação de modelos para tais determinações. Para isso serão utilizadas duas técnicas de alta resolução espacial: microscopia confocal de fluorescência por varredura a laser, e imagens de tempo de vida de fluorescência, acoplada com análises estatísticas multivariadas supervisionadas e não supervisionadas. O desafio deste projeto é quantificar e mapear em tempo real a concentração e localização de diversos fotossensibilizadores nas regiões sub-celulares, antes de efetivamente ativá-lo com a luz dando início à PDT, buscando assim novos protocolos de aplicação desta técnica de modo a aumentar a sua eficiência.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Microscopia confocal. Fotossensibilizadores.

### Referências:

1 BAGNATO, V. S. **Terapia fotodinâmica dermatológica:** programa TFD Brasil. São Carlos: Compacta, 2015. 313 p.

2 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. R61-R109, 2008.



## PG166

# Comparação e caracterização de redes de interação de proteínas

RONQUI, J. R. F.<sup>1</sup>; BAGNATO, G. G.<sup>1</sup>; TRAVIESO, G.<sup>1</sup>

jose.ronqui@usp.br

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

Na natureza existem diversos sistemas que podem ser descritos como redes (1): sempre que o sistema possa ser modelado como elementos que apresentem algum tipo de interação entre si. Não é raro que essas redes possuam características topológicas interessantes que estão relacionadas com as funções desempenhadas por elas. A comparação de redes pode ser útil, portanto, para estudar e comparar os sistemas que são representados por elas. Assim é interessante o desenvolvimento de métodos de diferenciação entre redes que nos indiquem quais delas são mais ou menos similares. Neste trabalho procuramos estudar e desenvolver algumas formas de análise, comparação e caracterização de redes complexas. As redes de interação de proteínas são responsáveis por controlar diversos processos celulares e devido à quantidade de elementos que as compõem e seu número de interações, apenas recentemente obtivemos dados com a confiabilidade necessárias para modelá-las como grafos. Desde então, muitos estudos sobre as interações de proteínas tem sido realizados em virtude das informações que elas podem fornecer sobre as funções realizadas por esses conjuntos de elementos. Considerando estes fatos, em nossas análises utilizamos redes representando interações entre proteínas, que foram montadas através do banco de dados STRING (2), e para a avaliação e validação dos métodos, também incluímos grafos gerados com os modelos de Erdős-Rényi e Barabási-Albert. No primeiro método empregamos as medidas de centralidade para caracterização de vértices e as suas correlações como propriedades das redes e posteriormente realizamos uma análise de componentes principais nessas características. Os resultados mostram que as relações entre as medidas de centralidade são diferentes para os três tipos de redes consideradas, e que é possível realizarmos comparação e classificação de redes e vértices através dessas medidas. Os resultados para os vértices das redes reais também apresentaram indicativos que os valores das centralidades das proteínas podem estar relacionadas com as funções que elas desempenham. No segundo estudo realizado utilizamos o espectro da matriz laplaciana (3) como característica das redes - que está relacionado com as suas propriedades topológicas - e uma análise de componentes principais para diferenciá-las. Este método também foi capaz de distinguir as redes de interação de proteínas dos modelos, de modo que sistemas do mesmo tipo fossem agrupados na mesma região do espaço. Esperamos que eles possam auxiliar na classificação automatizada de redes, como por exemplo árvores filogenéticas de organismos, e no estudo de novos padrões estruturais presentes nos sistemas complexos. Outra possibilidade que pode surgir do trabalho é a atribuição de novas funções às proteínas ou mesmo o desenvolvimento de um método computacional de classificação baseado na projeção dos vértices no espaço da análise de componentes principais.

**Palavras-chave:** Redes complexas. Interação de proteínas. Caracterização de redes.

**Referências:**



- 1 NEWMAN, M. E. J. **Networks**: an introduction. Oxford: Oxford University Press, 2010. 772 p.
- 2 SZKLARCZYK, D. et al. STRING v10: protein-protein interaction networks, integrated over the tree of life. **Nucleic Acids Research**, v. 43, p. D447-D452, 2015. doi: 10.1093/nar/gku1003.
- 3 MIEGHEM, P. **Graph spectra for complex networks**. New York: Cambridge University Press, 2011. 364 p.



## PG167

# Development of a fluorescence lifetime imaging rigid endoscope for clinical applications

ROSA, R. G. T.<sup>1</sup>; JO, J.<sup>2</sup>; PRATAVIEIRA, S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

ramongabriel.tr@gmail.com

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

<sup>2</sup>Texas A&M University - TAMU

Fluorescence based microscopy techniques have been extensively used in biological sciences due to their remarkable capability of investigating biochemical properties and cellular morphology of tissues. (1) The most common approach is the steady-state fluorescence microscopy, in which the resulting image contains essentially information about the sample native fluorescence spectrum or the enhanced fluorescent marked signal from a target biomolecule. Although the said approach is very powerful, it is often not enough to identify several chemical processes that may indicate relevant conditions of biological tissues. Furthermore, the fluorescence spectrum of a turbid sample may be affected by the absorption and elastic scattering on both the excitation and emission wavelengths. Interrogating beyond the steady-state approach it is possible to acquire information about the intrinsic properties of the tissue. The fluorescence dynamics analysis is not only less sensitive to the medium scattering and absorption 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. The system features a handheld probe designed to allow tissue interrogation of non-directly accessed areas like the cervix.

**Keywords:** Biophotonics. FLIM. Microscopy.

### Referências:

1 MARCU, L. Fluorescence lifetime techniques in medical applications. **Annals of Biomedical Engineering**, v. 40, n. 2, p. 304-331, 2012. doi: 10.1007/s10439-011-0495-y.



## PG168

# Regulação de biofilme bacteriano através de domínios GGDEF-EAL.

ROSSETO, F. R.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

rosseto@gmail.com

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

A formação de biofilmes bacterianos é um fenômeno bem conhecido, caracterizado pela formação de uma comunidade bacteriana estática, embebida em uma matriz exopolimérica, regulada pela molécula sinalizadora, c-di-GMP. (1) Os domínios proteicos que catalisam a síntese (GGDEF) e degradação (EAL e HD-GYP) de c-di-GMP estão presentes em grande quantidade em quase todos os genomas bacterianos sequenciados até hoje. Dentre as diversas proteínas envolvidas nas vias de sinalização mediadas por esse nucleotídeo, uma grande parcela possui hélices transmembranares, responsáveis pelo ancoramento dessas proteínas à membrana ou conexão de domínios citoplasmáticos a domínios periplasmáticos, como é o caso da STM3615 de *Salmonella enterica*, que apresenta os domínios citoplasmáticos GGDEF, degenerado, EAL, conservado, e um domínio periplasmático de função desconhecida. Em diferentes construções envolvendo esses domínios, obteve-se a estrutura cristalográfica dos domínios GGDEF-EAL que ao ser comparada com proteínas de arquitetura próxima a STM3615, como a LapD (2) de *Pseudomonas fluorescens*, de domínios GGDEF e EAL degenerados ou conservados como a MorA de *Pseudomonas aeruginosa* (3), diferenciam-se principalmente pela hélice que conecta tais domínios. Aqueles com EAL ativo, MorA e STM3615, apresentam hélices maiores, se comparados com EAL degenerados, LapD. A proposta do mecanismo de regulação da síntese e degradação de c-di-GMP apresentada neste trabalho para MorA ainda diferencia-se e não se aplica à STM3615, em que a hipótese é que a STM3615, juntamente com outras proteínas, controlam o pool de c-di-GMP local, que pode ser alterado por um estímulo no domínio periplasmático, transmitindo a sinalização através do HAMP para as demais proteínas envolvidas, alterando assim, o pool de c-di-GMP e promovendo a dispersão do biofilme bacteriano. Os resultados deste trabalho e os disponíveis na literatura, juntamente com a análise de outras cento e cinquenta sequências de proteínas contendo domínios GGDEF-EAL, possibilitaram generalizar os mecanismos de regulação dessas proteínas *dual domain*, inclusive do caso em que apenas o domínio GGDEF encontra-se na forma ativa.

**Palavras-chave:** GGDEF-EAL. c-di-GMP. Biofilme.

### 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: 10.1146/annurev.micro.54.1.49.

2 NAVARRO, M. V. et al . Structural basis for c-di-GMP-mediated inside-out signaling controlling periplasmic proteolysis. **PLoS Biology**, v. 9, n. 2, p. 152-170, 2011.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 PHIPPEN, C. W. et al. Formation and dimerization of the phosphodiesterase active site of the *Pseudomonas aeruginosa* MorA, a bi-functional c-di-GMP regulator. **FEBS Letters**, v. 588, n. 24, p. 4631-6 , 2014.



## PG169

### Simulações quânticas

ROSSETTI, R. F.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

rafael.rossetti@usp.br

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

No início da década de 80, estava claro que a simulação de sistemas quânticos era um grande desafio. Em primeiro lugar devido a quantidade de memória computacional necessária para a reprodução do comportamento desses sistemas uma vez que a dimensão do espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o número de partículas. Além disso, a evolução temporal do sistema quântico requer um número de operações que também aumenta exponencialmente com o número de partículas. Dado que esses crescimentos exponenciais não têm como ser evitados, apenas métodos aproximados podem ser utilizados para simplificar o problema, como, por exemplo, o método de Monte Carlo. No entanto, a depender do sistema quântico a ser estudado, estas aproximações não são suficientes e apresentam limitações. A ideia para resolver o problema desses crescimentos exponenciais veio de Richard Feynman com a computação quântica. Esta pode ser tratada como um simulador de sistemas físicos que requerem grande controle e precisão das medidas experimentais. Um dos sistemas que apresenta esses requisitos é a armadilha iônica. Atualmente, o interesse em computação quântica vem crescendo devido às aplicações em diversas áreas do conhecimento como física, química e biologia. A química, uma excelente plataforma para a compreensão da matéria da escala atômica até a molecular, representa uma das mais bem sucedidas aplicações da mecânica quântica. Em 1929, Dirac especulou que as leis fundamentais da química eram completamente conhecidas, mas a aplicação dessa teoria nos leva a equações cujas soluções não são possíveis analiticamente e inviável computacionalmente. Com o desenvolvimento do computador vários métodos foram criados tais como Hartree-Fock, Monte Carlo quântico, entre outros. No entanto, todos esses métodos falham em sistemas quânticos em função do mencionado crescimento exponencial da dimensão do espaço de Hilbert; logo, não é possível abordar sistemas quânticos em grande escala. (1) Para isso desenvolvemos uma engenharia de hamiltonianos no sistema de íons armadilhados, que apresenta os requisitos básico de um computador quântico. (2) Com isso temos por objetivo simular o potencial molecular de Morse que contribui para resolver problemas com muitos corpos interagentes, e reproduzir alguns potenciais moleculares que não são conhecidos teoricamente por completo. Também simulamos os operadores de momento angular, que em sistema de íons armadilhados podem contribuir não apenas para a química como também para a física no contexto da computação quântica, pois é capaz de levar à proteção de qubits e estados emaranhados. Além disso, a simulação do operador momento angular acarreta a interessantíssima interação coletiva dos estados eletrônicos de uma cadeia de íons com dois modos normais de vibração da mesma. Essa interação coletiva pode levar à preparação e proteção de estados emaranhados envolvendo toda a cadeia de íons. Para finalizar simulamos, no contexto de íons armadilhados, o princípio da exclusão de Pauli que permite criar uma rede de férmions a partir de uma coleção de bósons, permitindo assim o estudo das interações fermiônicas e do comportamento coletivo da rede.

**Palavras-chave:** Simulação quântica. Íons armadilhados. Proteção de estados quânticos.





### Referências:

- 1 YUNG, M. H. et al. From transistor to trapped-ion computers for quantum chemistry . **Scientific Reports**, v. 4, n. 3589, p. 1-7, 2014. doi: 10.1038/srep03589.
- 2 GERRITSMA, R. et al. Quantum simulation of the Dirac equation. **Nature**, v. 463, n. 7277, p. 68-71, 2010. doi: 10.1038/nature08688.



## PG170

# Optical and fundamental band gaps disparity of the $\text{In}_2\text{O}_3$ and $\text{SnO}_2$ systems revisited

SABINO, F. P.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, L. N.<sup>1</sup>; WEI, S.-H.<sup>2</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>3</sup>

fernandopsabino@yahoo.com.br

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

<sup>2</sup>Beijing Computational Science Research Center - CSRC

<sup>3</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

In the 1960s, based on optical measurements in a single crystal of  $\text{In}_2\text{O}_3$ , a small peak located in low energies was detected and attributed to a indirect type of optical transition. However this results has never been confirmed theoretically. In fact, Walsh *et al.* (1) based on density functional theory (DFT) calculation, identified a direct band gap and attribute the transparence of  $\text{In}_2\text{O}_3$  to a large number of dipolar forbidden optical transition from states in the vicinity of valence band maximum (VBM) to the conduction band minimum (CBM), increasing the optical band gap from 2.90 eV to 3.60 eV. More recently, Sabino *et al.* (2), also using DFT calculation, identified three condition that explain the disparity between the gaps for the  $\text{In}_2\text{O}_3$  ( $M = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ ) oxides, which are based on: (i) crystal structure with inversion symmetry; (ii) CBM formed by cations and O  $s$ -states; and (iii) high  $p$ - $d$  coupling in the vicinity of VBM. Moreover, the  $\text{SnO}_2$  is a large used TCO, and have been widely studied both theoretically and experimentally, where the optical band gap have received special attention. Several measurement obtained a fundamental band gap of 3.60 eV which is confirmed by DFT-GW calculation. Similarly to the  $\text{In}_2\text{O}_3$ , the  $\text{SnO}_2$  have the transition from VBM to CBM dipolar forbid, fact which would we expect an increase in optical band gap, nonetheless, it has never been reported. Therefore there is a puzzle here: if there is forbids dipolar transition for both oxides,  $\text{SnO}_2$  and  $\text{In}_2\text{O}_3$ , why the disparity between the optical and fundamental band gap is reported only for  $\text{In}_2\text{O}_3$ ? To address this question, we used the DFT calculation with the semi-local exchange and correlation PBE functional to calculate the optical properties of both oxides. We confirm that the bixbyite  $\text{In}_2\text{O}_3$  and rutile  $\text{SnO}_2$  have similar optical behavior about the forbidden dipolar transition, also the DFT calculation indicates that, depending of the light intensity, there are two distinct optical band gap. For single pure crystals and with high light intensity, the small absorption coefficients associated with the weak transition can be detected, and the extrapolation of which determines an optical gap called here as bright. This bright optical gap coincides with the fundamental band gap, explaining all the results of  $\text{SnO}_2$  and the results of 1960s for  $\text{In}_2\text{O}_3$ . In contrast, under low illumination, only the high transition at Gamma-point can be detected, following the Sabino *et al.* mechanism, and this optical gap is called dark. The dark gap of  $\text{In}_2\text{O}_3$  and  $\text{SnO}_2$  are substantially wider than the fundamental gaps. Therefore, the key to solve the puzzle is the optical intensity in measurements of the absorption spectra. Furthermore our calculations predict that, measured under low illumination, the optical gap for rutile  $\text{SnO}_2$  will increase, from 3.60 eV to 4.34 eV.

**Palavras-chave:** Optical band gap. Indium oxide. Tin oxide.



### Referências:

1 WALSH, A. et al. Nature of the band gap  $\text{In}_2\text{O}_3$  revealed by first-principles calculations and X-ray spectroscopy. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 16, p. 167402-1-167402-4, 2008. doi: 10.1103/PhysRevLett.100.167402.

2 SABINO, F. P. et al. Origin of and tuning the optical and fundamental band gaps in transparent conducting oxides: the case of  $\text{M}_2\text{O}_3$  ( $\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ ). **Physical Review B**, v. 92, n. 20, p. 205308-1-205308-7, 2015. doi: 10.1103/PhysRevB.92.205308.



## PG171

# Conjugation of Pulchelline A chain and Ricin A chain to HIV mAbs, and study the characterization and cell internalization by using confocal microscopy and flow cytometry

SADRAEIAN, M.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>; PINCUS, S.<sup>2</sup>; ARAÚJO, A. P. U.<sup>1</sup>; HELLEN, H.<sup>1</sup>

msadraeian@usp.br

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

<sup>2</sup>Louisiana State University Health Sciences Center - LSUHSC

Introduction: Immunotoxins (ITs), which consist of antibodies chemically conjugated to toxins, have been proposed as a treatment for cancer and chronic infections. (1) Antibody drug conjugates have largely replaced ITs for use in cancer, where the target is a proliferating cell. (1) For HIV infection, the target cell may be a resting or a non-dividing cell, and so ITs may be the best method to kill infected cells. The envelope (Env) glycoprotein of HIV is the only intact virus protein expressed on the surfaces of virions and infected cells. (2) Here we have compared two different plant toxins, Recombinant A chains from Ricin (RAC) or Pulchelline (PAC) toxins, for their ability to kill Env-expressing cells. The toxin Pulchellin, isolated from the *Abrus pulchellus* plant, is a type II ribosome inactivating protein, has similar structure and function to ricin. (3) Methods: RAC and PAC were produced in *E. coli*, and chromatographically purified. These were chemically conjugated to two different anti-HIV monoclonal antibodies (mAbs), anti-gp120 mAb 924 or anti-gp41 mAb 7B2. These conjugates were characterized biochemically and immunologically. We then tested their ability to kill HIV-infected cells (H9/NL4-3) or Env-transfected 293T cells, respectively. The internalization and co-localization of the Alexa 488- labeled ITs were studied for both non/transfected 293T cells by using quantitative confocal imaging and flow cytometry. Results: Both A chains were conjugated equally to 924, however with 7B2 we obtained a superior conjugation with Pulchelline. Immunologic function of the antibodies in the ITs was unaffected by the conjugation process. The cytotoxicity of 924-RAC was approximately 3X greater than 924-PAC, whereas 7B2-RAC and 7B2-PAC have equivalent killing activity. The presence of anti-gp120 (sCD4) showed a synergic effect on 7B2 based ITs. Alexa 488 labeled ITs accumulated on the surface of transfected 293T cells fixed by NaAz. The live microscopy showed ITs enter cells and penetrate to the endoplasmic reticulum within 30 min. Quenching effect of Trypan Blue (TP) discriminated the internalized ITs from those attached to the cell membrane. Conclusion: We have shown that PAC can function within an effective IT. PAC toxicity appears somewhat less than RAC, the standard for comparison. We showed the dynamic nature of the interaction between HIV transfected cell and ITs, regarding intracellular mechanism. This is the first demonstration that PAC may have utility for the design and construction of therapeutic ITs, highlighting the potential role for specific cell targeting.

**Keywords:** Immunotoxin. HIV transfected 293T cell. Quantitative confocal imaging.

**Referências:**



1 SONG, K. et al. Antibody to Ricin A chain hinders intracellular routing of toxin and protects cells even after toxin has been internalized. **PLoS One**, v. 8, n. 4, p. e62417-1-e62417-18, 2013. doi: 10.1371/journal.pone.0062417.

2 CRAIG, R. B. et al. Anti-HIV double variable domain immunoglobulins binding both gp41 and gp120 for targeted delivery of immunoconjugates. **PLoS One**, v. 7, n. 10, p. e46778-1-e46778-13, 2012. doi: 10.1371/journal.pone.0046778.

3 CASTILHO, V. P. et al. Isolation and characterization of four type 2 ribosome inactivating pulchellin isoforms from *Abrus pulchellus* seeds. **FEBS Journal**, v. 275, n. 10, p. e284-1-e259-12, 2008. doi: 10.1111/j.1742-4658.2008.06258.x.



## PG172

# Conversion of poly(xylylidene tetrahydrothiophenium chloride)(PTHT) in poly(p-phenylenevinylene)(PPV) by femtosecond pulses

SALAS, O. A.<sup>1</sup>; BALOGH, D. T.<sup>1</sup>; ALMEIDA, J. M. P.<sup>1</sup>; FONSECA, R. D.<sup>1</sup>; ALMEIDA, G. F. B.<sup>1</sup>; HENRIQUE, F. R.<sup>1</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

oriana@ifsc.usp.br

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

Electroluminescent polymers have emerged as interesting materials with great potential for technological applications due to the combination of favorable mechanical and processing features with the electronic properties of inorganic semiconductors. The poly (p-phenylene vinylene) (PPV) has been one of the most studied materials because of its light emitting properties and potential applications in electroluminescent devices, such as light emitting diodes and photovoltaic cells. PPV is obtained from the chemical synthesis of a soluble precursor polymer, the poly (tetrahydrothiophene chloride xililideno) or PTHT (1), which is processed into film and subjected to a thermal conversion step for removal of sulfonic groups. In this work, we demonstrate the conversion of the precursor polymer PTHT into PPV using femtosecond laser pulses. By focusing the laser beam onto the sample, we have been able to promote the sample conversion only around the focal volume, i.e., within a confined region of the material. By moving the sample relative to the beam, well defined patterns can be produced, open the doors for new concepts in devices fabrication.

**Keywords:** Precursor polymer. PPV. Femtosecond laser pulses.

### Referências:

1 BRADLEY, D. D. C. Precursor-route poly(p-phenylenevinylene): polymer characterisation and control of electronic properties. **Journal of Physics D**, v. 20, n. 11, p. 1389-1410, 1987.



## PG173

# Estudos de modelagem molecular de moduladores de microtúbulos bioativos

SALCEDO, D. L. P.<sup>1</sup>; MAGALHÃES, L. G.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

palomino@ifsc.usp.br

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

O Câncer constitui um conjunto de doenças caracterizadas pela existência de tumores formados pela multiplicação de células anormais, que são insensíveis aos mecanismos de controle e defesa do organismo e possuem a capacidade de dar origem a tumores secundários (metástase) por meio da invasão e migração de diversos tecidos. (1) De acordo com dados do Instituto Nacional do Câncer (INCA), estima-se no biênio 2016-2017, a ocorrência de cerca de 600 mil casos novos de câncer. (2) A proteína tubulina está diretamente envolvida no processo de divisão celular, através da formação de estruturas proteicas denominadas microtúbulos que, por sua vez, constituem as fibras do fuso. (3) Dessa forma, sua modulação pode interromper a proliferação celular descontrolada. De fato, diversos agentes antimitóticos estão disponíveis na terapia para vários tipos de câncer, dentre eles podemos citar o taxol, taxorete, vincristina e vimblastina. Nesse contexto, o presente projeto de doutorado visa à identificação e otimização de novas moléculas com atividade antitumoral. A metodologia do projeto inclui a integração de diversos métodos computacionais (Dinâmica molecular, Docking, Modelagem molecular, entre outros) para a otimização e identificação de moduladores da proteína tubulina.

**Palavras-chave:** Tubulina. Microtubulos. Dinâmica molecular.

### Referências:

- 1 BRASIL, Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva. **Câncer:** o que é?. Disponível em: <<http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/cancer/site/oquee>>. Acesso em: 25 ago. 2016.
- 2 BRASIL, Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva. **Estimativa 2016:** incidência de câncer no Brasil. Rio de Janeiro: INCA, 2015. 122 p.
- 3 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.



## PG174

# Characterization of odorant-binding proteins of *Rhodnius prolixus*

SAMPAIO, R. P.<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

renataportosampaio@gmail.com

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

Specific insect behavior originally depends of signals given by the environment as semiochemicals perceived by a sophisticated olfactory system. Although some insects are essential to life as we see it, like the honey bee - *Apis mellifera*; others affect negatively human society, acting as pests or vectors of diseases. (1) *Rhodnius prolixus* is a blood-feeding triatomine bug and an important Chagas disease vector in Brazil. According to the World Health Organization, the vector control remained the most effective method of preventing transmission of the parasite causer of this disease, *Trypanosoma cruzi*, in Latin America. Here we investigated Odorant-binding proteins (OBPs) related to the process of reception of semiochemicals, aiming to understand the essential to develop strategies to manipulate insect behavior and prevent the spread of Chagas. OBPs are small (15-17 kDa) water-soluble extracellular proteins that links the external environment and odorant-receptors. Odorants that enter the sensillum pores are bound and solubilized by OBPs, and then, transported through the sensillar lymph to receptors in the chemosensory neurons. (1) Four putative genes of odorant-binding proteins of *Rhodnius prolixus*, were selected using bioinformatics tools and cloned into expression vectors and expressed in different cell lines. The expression of the "OBP 8" was accomplished using the construction pET22b(+) in *Escherichia coli* (BL21 (DE3)). The purification is been tested with the periplasm of the bacterial cell, since the periplasm contains less proteins and the oxidizing environment facilitates the proper folding. (2) Anion-exchange and molecular exclusion chromatography are been optimized to increase the amount of protein obtained. Subsequent tests will be done using Differential Scanning Fluorimetry (DSF) to optimize the purification buffer, and Circular Dichroism (CD) for secondary structure composition. In combination with protein characterization, trials tracking crystallization conditions will be done. Two others OBPs are been expressed and will be characterized. These results will provide insight into the function and structure of OBPs allowing a more targeted approach of vector control and the possibility to use such small proteins as biotechnological tools.

**Keywords:** Odorant-binding proteins. *Rhodnius prolixus*. Chagas disease.

### Referências:

- 1 LEAL, W. S. Odorant reception in insects: roles of receptors, binding proteins, and degrading enzymes. **Annual Review of Entomology**, v. 58, p. 373-391, 2013. doi: 10.1146/annurev-ento-120811-153635.
- 2 MAKRIDES, S. C. Strategies for achieving high-level expression of genes in *Escherichia coli*. **Microbiology and Molecular Biology Reviews**, v. 60, n. 3, p. 512-518, 1996.





## PG175

# Coupled oscillators and Ott-Antonsen invariant manifold description

SANTOS, E. R.<sup>1</sup>; ELDERING, J.<sup>2</sup>; PEREIRA, T.<sup>2</sup>

edmilson.roque.santos@usp.br

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

<sup>2</sup>Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação - USP

In nature we found several systems consisting of a large number of interacting oscillators. Examples are diverse, for instance in neuronal dynamics, pathological tremors as epileptic seizures, or even, in circuits dynamics with superconductor Josephson junction arrays. A common characteristic of these systems is that both of them display spontaneous emergence of collective behaviour. Efforts to model these problems had focused on ensembles of globally coupled oscillators. Historically, numerical experiment evidence suggested that the dynamics of such systems was low-dimensional. (1) In this perspective, Ott and Antonsen have proposed an ansatz to obtain the low-dimensional dynamics in a heterogeneous coupled oscillators system (of nonlinear differential equations), when the distribution of frequencies is a Lorentzian distribution. (2) The authors have considered the limit of infinite oscillators, what changed to a partial differential equations system problem. They have realized that instead of an infinite-dimensional space of density functions, it was necessary only a finite space determined by two-dimensional macroscopic variables, what it called Poisson invariant submanifold. The invariance of such manifold can be understood as follows: if the density of oscillators is given by the Poisson kernel, it remains at same form for all time. In this way, we aim in this project proving that the Poisson manifold is a normally attracting invariant manifold. It corresponds to a manifold which although the system is perturbed slightly, the system's behaviour persists. The current stage of the project focused on identical coupled oscillators. The treatment is based on a Lie subgroup of Möbius transformations, which three parameters of such group generates the low-dimensional description, also called group symmetry reduction. (3) The important remark associated to this symmetry formulation is there exists a connection to Ott-Antonsen manifold, which we plan to study in the future work.

**Keywords:** Synchronization. Coupled oscillators. Ott-Antonsen manifold.

### Referências:

- 1 WATANABE, S. ; STROGATZ, S.H. Constants of motion for superconducting Josephson arrays . **Physica D**, v. 74, n. 3-4, p. 197-253, 1994. doi: 10.1016/0167-2789(94)90196-1.
- 2 OTT, E. ; ANTONSEN, T. M. Low dimensional behavior of large systems of globally coupled oscillators. **Chaos**, v. 18, p. 037113, 2008. doi: 10.1063/1.2930766.
- 3 MARVEL, S. A. ; MIROLLO, R. E. ; STROGATZ, S. H. Identical phase oscillators with global sinusoidal



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

coupling evolve by Möbius group action. **Chaos**, v. 19, p. 043104, 2009. doi: 10.1063/1.3247089.



## PG176

# Top gated graphene field effect transistors for sensing applications

SANTOS, F. A.<sup>1</sup>; VIEIRA, N. C. S.<sup>1</sup>; ZAMBIANCO, N.<sup>2</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

fabricioaps@usp.br

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

<sup>2</sup>Departamento de Química - UFSCar

Graphene is a two-dimensional nanomaterial of sp<sup>2</sup> carbon atoms in a hexagonal lattice. (1) This material has received great attention in recent years due to its extraordinary electronic properties, such as high conductance, high mobility of electrons and holes. Graphene is also promising material in the development of field-effect transistor in electronic. However, limitations regarding the processing of graphenes are the low dispersivity in water, the difficulty of functionalization and deposition in different substrates, as well as the development in industrial scale. Chemical exfoliating of graphite is a suitable method to the production of a water-dispersible derivative of graphene on a large scale, namely Graphene Oxide (GO). We demonstrate a versatile layer-by-layer (LBL) assembly of positively and negatively charged rGO (reduced-GO) sheets in interdigitated electrodes for top-gated field effect transistors (FET) devices. Our results evidenced the good optical and electrical proprieties of the GO, being possible to control the conductivity of holes and electrons depending on the number of bilayers. FET devices fabricated using the GOs showed response to ionic strength, and pH. The method presented here may be of interest in the large-scale production of top-gated FET devices for sensing applications.

**Keywords:** Graphene. Fet. Sensors.

### Referências:

1 NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Nature**, v. 306, n. 5696, p. 666-669, 2004.



## PG177

# Anisotropic water adsorption on gypsum (010) from a combination of SFG vibrational spectroscopy and molecular dynamics simulations

SANTOS, J. C. C.<sup>1</sup>; NEGREIROS, F. R.<sup>2</sup>; DALPIAN, G. M.<sup>2</sup>; PEDROZA, L. S.<sup>2</sup>; MIRANDA, P. B.<sup>1</sup>

jaciaraacassia@gmail.com

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

<sup>2</sup>Centro de Ciências Naturais e Humanas - UFABC

A detailed microscopic understanding of the structure of interfacial water is highly relevant to numerous fields of science and technology. In particular, the water-mineral interfaces are important for a variety of environmental, industrial, biological and geological processes. Although adsorbed water has been the subject of extensive studies for a long time (1-2) only recent techniques have the selectivity and sensitivity to study this interfaces (e.g. sum-frequency generation vibrational spectroscopy, scanning polarization force microscopy and other microscopy techniques). (3) Sum-frequency generation (SFG) is unique for its ability to obtain the vibrational spectra solely at interfaces even in the presence of resonant bulk absorption and is also very sensitive to the orientation of the moieties that contribute to the SFG spectrum. Gypsum single crystal is a layered crystal with molecular planes linked through weak hydrogen bonding, allowing the perfect cleavage of (010) faces. Here we use a combination of SFG spectroscopy and molecular dynamics (MD) simulations to investigate the structure, H-bonding and dynamics of the cleaved gypsum (010) surface and of the adsorbed water layer at room temperature. The calculated vibrational spectra from the ab-initio MD simulations were directly compared with the SFG experiments, validating the simulations, providing additional insights into the molecular structure and dynamics that would be difficult to infer from the experiments alone. The SFG spectra of gypsum surface showed anisotropic arrangement of structural water molecules along the cleavage plane and the presence of dangling free OH groups. The adsorbed water also revealed an anisotropic arrangement, although different from that of the structural water, and with much less free OH groups at the surface.

**Keywords:** Gypsum. Confined water. Sum frequency generation.

### Referências:

- 1 THIEL, P. A; MADEY, T. E. The interaction of water with solid surfaces: fundamental aspects. **Surface Science Reports**, v. 7, n. 6-8, p. 211-385, 1987. doi: 10.1016/0167-5729(87)90001-X.
- 2 HENDERSON, M. A. The interaction of water with solid surfaces: fundamental aspects revisited. **Surface Science Reports**, v. 46, n. 1-8, p. 1-308, 2002. doi: 10.1016/S0167-5729(01)00020-6.
- 3 MIRANDA, P. B. et al. Icelike water monolayer adsorbed on mica at room temperature. **Physical Review Letters**, v. 81, n. 26, p. 5876-5879, 1998. doi: 10.1103/PhysRevLett.81.5876.



## PG178

# Theranostic plasmonic nanoparticles for application in cancer phototherapy

SANTOS, O. A.<sup>1</sup>; CANCINO-BERNARDI, J.<sup>1</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

olavo.a.santos@gmail.com

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

Theranostic nanoparticles have acquired great interest due to their abilities to act at the intersection between treatment and diagnosis, combining both paradigms into a single agent. Polymer/gold hybrid nanoparticulate systems have gained prominence due to their electronic absorption in the near infrared region, being suitable for applications in theranostic procedures. (1-2) We present a plasmonic polymeric nanoparticle that exhibits a highly tunable localized surface plasmon resonance (LSPR) absorbance achieved by a single step via in situ reduction of gold at the polymer/water interface. Through slight variations in synthesis parameters, we obtained nanoparticles with controlled morphologies and tunable LSPR maxima ranging from 600 to 1100 nm, region in which light can penetrate deeper into human tissues, allowing optimal phototherapies. (3) The nanoparticles presented high photothermal effects under irradiation of a 808 nm laser, showing encouraging responses for photothermal therapy of cancer. Moreover, the system conferred considerable photoacoustic response, being a promising candidate for photoacoustic imaging contrast agent.

**Keywords:** Plasmonic PLA nanoparticles. Photothermal therapy. Theranostics.

### Referências:

1 TOPETE, A. et al. Polymeric-gold nanohybrids for combined imaging and cancer therapy. **Advanced Healthcare Materials**, v. 3, n. 8, p. 1309-1325, 2014. doi: 10.1002/adhm.201400023.

2 YANG, J. et al. Smart drug-loaded polymer gold nanoshells for systemic and localized therapy of human epithelial cancer. **Advanced Materials**, v. 21, n. 43, p. 4339-4342, 2009. doi: 10.1002/adma.200900334.

3 JAQUE, D. et al. Nanoparticles for photothermal therapies. **Nanoscale**, v. 6, n. 16, p. 9494-9530, 2014. doi: 10.1039/C4NR00708E.



## PG179

# Characterization of components of the selenocysteine biosynthesis and insertion pathways in *Naegleria gruberi*: selenophosphate synthetase and tRNA<sup>Sec</sup>

SANTOS, T. M.<sup>1</sup>; THIEMMAN, O. H.<sup>1</sup>

thomas.ms@usp.br

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

Selenocysteine (Sec), also known as the twenty-first amino acid, represents the main available organic form of selenium, an essential micronutrient. The functioning and regulation of the selenium metabolism in the three domains of life is still under study and the existence of differences in the Sec synthesis pathway between the domains (1) justify studies evaluating its particular evolutionary consequence and potential practical use. *Naegleria gruberi*, the organism studied in this project, presents itself as quite an interesting target for understanding the evolution of the processes of synthesis and incorporation of the amino acid in the eukaryotic domain of life due to its privileged position in the evolutionary scale as an early eukaryote. Recently, a gene encoding for the protein Selenophosphate synthetase (SPS2) has been identified in *N. gruberi*. (2) SPS2 is 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 intermediary in the selenocysteine synthesis process. The *N. gruberi*'s SPS2 contains two distinct domains: the C-terminal domain, which shows 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<sup>Sec</sup>. This specific transfer RNA promotes the insertion of selenocysteine into selenoproteins while translating the UGA codon, which is most often interpreted as a stop codon during mRNA translation. In addition to this, bioinformatics data indicate the existence of yet another tRNA translating the UGA codon, suggesting two possible hypotheses: it could either be an additional tRNA<sup>Sec</sup> for incorporation of Sec in growing polypeptide chains or a tRNA that carries another amino acid, hitherto unknown, with the ability to recognize the same codon. The present project intends to study the SPS2 domain which has a high sequence identity with prokaryotic methyltransferases, regarding not only its physiological role but also its expression levels and localization in the cell and its variations throughout the protozoan's different stages of life. In addition, this project proposes experiments allowing the elucidation of the newly identified tRNA's function. For the SPS2 domain, the protein has already been heterologously expressed in *E. Coli*, but has shown some difficulties in remaining soluble after the extraction process. To circumvent this fact, the protein was urea denatured before the purification process and used to produce polyclonal antibodies. The antibodies have shown good specificity for the protein and now immunoprecipitation and immunofluorescence experiments are underway. RT-qPCR is being used to measure the gene's expression levels variations between *Naegleria*'s different forms of life. For the tRNA, the isolation of the two different tRNA<sup>Sec</sup> candidates has already been done. RT-qPCR experiments are being run to determine their relative expression levels. Molecular biology experiments are planned to help identify any post-transcriptional editing or modification process that may have occurred. Together, these experiments may contribute to the elucidation of some key aspects of the selenium metabolism in eukaryotes.



**Keywords:** *Naegleria gruberi*. Selenocysteine. tRNA<sup>Sec</sup>.

**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. A. et al. Selenocysteine biosynthesis and insertion machinery in *Naegleria gruberi*. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 188, n. 2, p. 87-90, 2013. doi: 10.1016/j.molbiopara.2013.04.002.



## PG180

# O uso de técnicas biofotônicas no diagnóstico de doenças de soja

SBRISSA NETO, D. A.<sup>1</sup>; MILORI, D. M. B. P.<sup>2</sup>

sbrissa@ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA

O agronegócio é uma das principais fontes da economia brasileira, representando cerca de 20% de toda a riqueza produzida no país. Dentre os produtos comercializados pelo Brasil, a soja ganha grande destaque no cenário, sendo responsável por aproximadamente 35,6% das exportações nacionais, totalizando U\$ 2,62 bilhões na safra 2014/1015. Em 2016, espera-se um aumento de cerca de 6,1% na produção da soja brasileira. Apesar dos números serem altamente favoráveis, a soja pode ser acometida por diversos patógenos externos, que causam perdas nas produções. Estima-se que as doenças de soja sejam responsáveis por perdas de 15% à 20% das exportações. Há doenças que, se não controladas, podem ocasionar perda de todo o plantio. Dentre os patógenos mais preocupantes, tem ganhado destaque pesquisas sobre a Soja Louca-II e a Ferrugem Asiática. Ambas as doenças são passíveis de controle. O controle da ferrugem asiática se dá na utilização de fungicidas e no adequado preparo no solo antes da plantação. Já o manejo da Soja Louca-II se dá através da remoção das plantas visivelmente infectadas, não dispondo ainda de um controle biológico ou químico mais eficiente. Sendo assim, torna-se necessário o reconhecimento precoce da inoculação dessas doenças, a fim de escolher a estratégia mais adequada para cada situação e/ou grau de infestação. Neste viés a utilização de técnicas biofotônicas tem se mostrado uma ferramenta bastante eficiente, seja no diagnóstico de doenças em plantas ou em diversas aplicações agricultura em geral. (1) O projeto a ser realizado tem como objetivo desenvolver ferramentas de aplicação no campo, que sejam eficientes no diagnóstico precoce da Soja Louca-II e da Ferrugem Asiática, a partir da análise via técnicas biofotônicas das folhas dos cultivares contaminados. Dentre as técnicas biofotônicas, pretende-se utilizar a fluorescência da folha, analisando tanto seu espectro como sua imagem. Esta técnica já se mostrou eficiente em pesquisas similares, na identificação de outras doenças em outros cultivares. (2) Para tal será utilizado o LIFS-405, equipamento montado e disponível nas dependências da EMBRAPA Instrumentação. Outras técnicas de análise, tais como luz polarizada, imagens térmicas e imagens luz branca também serão passíveis de utilização. A ideia central da utilização destes é identificar a técnica mais eficiente e qual delas teria o melhor custo/benefício com potencial para se tornar equipamento de campo. Pretende-se fazer experimentos controlados com plantas de soja em estufas ou casas de vegetação, inoculando-se a doença a ser estudada e fazendo acompanhamento periódico de seu desenvolvimento. Para a análise das informações obtidas das técnicas (espectros e imagens) serão utilizadas técnicas consagradas em processamento e análise de imagens e reconhecimento de padrões. Parte do projeto destinar-se-á desenvolver algoritmos de classificação eficientes para os casos propostos. Tais algoritmos poderão, por fim, tornar base para o desenvolvimento de equipamentos de diagnóstico.





**Palavras-chave:** Soja. Técnicas biofotônicas. Análise de imagens.

**Referências:**

1 TADINI, A. M. et al. The importance of humin in soil characterisation: a study on Amazonian soils using different fluorescence techniques. **Science of the Total Environment**, v. 537, p. 152-158, 2015. doi: 10.1016/j.scitotenv.2015.07.125.

2 PEREIRA, F. M. V. et al. Laser-induced fluorescence imaging method to monitor citrus greening disease. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 79, n. 1, p. 90-93, 2011. doi: 10.1016/j.compag.2011.08.002.



## PG181

# Complex networks on the analysis of multispectral images obtained by confocal laser scanning microscopy

SCABINI, L. F. dos S.<sup>1</sup>; BRUNO, O. M.<sup>1</sup>

scabini@ifsc.usp.br

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

Confocal Laser Scanning Microscopy (CLSM) is a technique to obtain a multispectral image in which the specimen is excited with a scanning laser beam that produces a point source of light in the object plane, and the resulting fluorescence from the stained microorganisms is detected by sensitive photomultipliers. (1) These images are used by researchers to study the material structure and composition. However, multispectral images carry far more information if compared to traditional formats (e.g. gray-level or RGB images), and most of the works in Computer Vision and correlated areas focus on methods dedicated to gray-level image analysis, ignoring or reducing the multispectral information. As in CLSM, images are generated with 32 channels, where each pixel value vary from 0 to 65535 (16 bits), and the native software of these microscopes performs a conversion that reduces the image to RGB format (3 channels with 8-bit pixels), in order to display it to the user. In this case, there is a loss of information of 10<sup>145</sup>%, considering the original image, due to lack of precise techniques in order to interpret the multispectral data. Moreover, multispectral images carry physicochemical properties of the material that can be lost in the process of conversion. In this context, Complex Network is a robust tool to analyze and characterize this kind of data, considering the large range of applications in recent network research. (2) This work focuses on new approaches to the multispectral analysis of images obtained by CLSM in the Institute of Physics of São Carlos. Techniques based on Computer Vision, Artificial Intelligence and mainly Complex Networks concepts will be approached to analyze the multispectral data generated by CLSM. The applications focus on plant sciences, on the study of phenotypic leaf plasticity and the identification of native Brazilian plant species.

**Keywords:** Complex network. Confocal laser scanning microscopy. Multispectral image.

### Referências:

- 1 BLOEM, J.; VENINGA, M; SHEPHERD, J.. Fully automatic determination of soil bacterium numbers, cell volumes, and frequencies of dividing cells by confocal laser scanning microscopy and image analysis. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 61, n. 3, p. 926–936, 1995. doi: PMC1388375.
- 2 COSTA, L.et al. Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of applications. **Advances in Physics**, v. 60, n. 3, p. 329–412, 2011. doi: 10.1080/00018732.2011.572452.



## PG182

# Dynamical correlation functions of a two-spin operator in quantum spin chains

SCHOSSLER, M. O.<sup>1</sup>; PEREIRA, R. G.<sup>1</sup>

matheus.schossler@gmail.com

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

Dynamical properties of quantum many body systems are a major topic of interest in condensed matter physics. These properties tell us about the propagation of elementary excitations and mechanisms of relaxation in interacting systems. In this context correlation functions have become even more relevant due the experiments in systems of cold atoms and trapped ions that measure real time dependence directly out to relatively long times. (1) But most studies in quantum spins chains so far have focused on correlations of single spins. (2) Using the one dimensional XX spin chain, we study exact methods to calculate the correlation functions of tensor operators involving two spins,  $T_{i,j}^{ab} = S_i^a S_j^b$ . These operators appear, for example, as a response of inelastic x-ray scattering cross section. Based on Wick's theorem, we show that some correlation functions of local tensor operators of two pairs of neighbor sites, in the fermion space, can be written as a combination of Green's functions of a single particle. We have used Feynman diagrams to organize this combination and calculate the correlation functions. Then, considering these propagators for long times and large distances along the light cone, we found the behavior of these correlation functions as a oscillatory and power law decay on time. We will also consider other two-spin operators which are not local in the fermionic representation. In this case the calculation is more challenging, but the time-dependent correlation functions can be expressed in terms of Fredholm determinants. (3)

**Keywords:** Quantum dynamics. Spin chains. Exact methods.

### Referências:

1 KNAP, M. et al. Probing real-space and time-resolved correlation functions with many-body Ramsey interferometry. **Physical Review Letters**, v. 111, n. 14, p. 147205-1-147205-6, 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.111.147205.

2 PEREIRA, R. G.; WHITE, S. R.; AFFLECK, I. Exact edge singularities and dynamical correlations in spin-1/2 chains. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 2, p. 027206-1-027206-4, 2008. doi: 10.1103/PhysRevLett.100.027206.

3 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. P070035-1-P070035-10, 2009. doi: 10.1088/1742-5468/2009/07/P07035.



## PG183

# Identificação e caracterização das proteínas interagentes ao elemento SECIS (SelenoCysteine Insertion Sequence) em *Naegleria gruberi*

SCORTECCI, J. F.<sup>1</sup>; SERRÃO, V. H. B.<sup>1</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

jessica.scortecci@usp.br

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

A existência de uma maior variedade de aminoácidos codificados pelo código genético 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 eucariotos, essa via é formada por uma complexa maquinaria molecular composta pelas enzimas O-fosfoseril-tRNA<sup>Sec</sup> Quinase (PSTK), Selenocisteinil-tRNA<sup>Sec</sup> Sintase (SepSecS), Seril-tRNA Sintetase (SerRS), Selenofosfato Sintetase (SelD), Selenocisteína Liase (NiFS), tRNA específico (tRNA<sup>Sec</sup>) e uma sequência específica no mRNA (Sequência de Inserção de Selenocisteínas - SECIS). Além desses elementos, a via possui proteínas interagentes ao elemento SECIS (SBP2) além de um Fator de Elongação Específico (EFSec). (1-2) Pelo fato do selênio ter uma toxicidade elevada no ambiente celular, é fundamental a compreensão dos mecanismos catalíticos desses elementos essenciais na formação dos complexos da via de incorporação junto ao tRNA<sup>Sec</sup>. Em *Naegleria gruberi*, uma sequência gênica putativa para SBP2 foi identificada. (3) Esse gene de interesse foi clonado em sistema de expressão procariótico (*E. coli*) para sua expressão e posterior purificação dos domínios amino terminal (*Ng*SBP2<sub>Nt</sub>) e carboxi terminal (*Ng*SBP2<sub>Ct</sub>) da SBP2. A caracterização biofísica das amostras foi realizada através de espectroscopia de dicroísmo circular e espalhamento de luz dinâmico. Ensaio de interação *Ng*SBP2<sub>Nt</sub>.SECIS e *Ng*SBP2<sub>Ct</sub>.SECIS foram realizados através de espectroscopia de anisotropia de fluorescência, indicando um KD = 174 nM para o domínio carboxi terminal e não interagente para o domínio amino terminal. Juntamente a isso, ensaios de imunofluorescência *in vivo* das *Ng*SBP2 serão realizados para verificação da localização dessas proteínas em ambiente celular. Além disso, testes de cristalização das construções truncadas, bem como espalhamento de raios-X a baixo ângulo (SAXS) serão realizados a fim de se obter informações estruturais uma vez que os truncamentos não possuem homólogos conhecidos. Dessa forma, este projeto visa ampliar o conhecimento e o entendimento das interações moleculares presentes na via de selenocisteínas.

**Palavras-chave:** Selenocisteína. Interação proteína-RNA. SECIS.

### Referências:

- 1 HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. N. How selenium has altered our understanding of the genetic code. **Molecular and Cellular Biology**, v. 22, n. 11, p. 3565-3576, 2002.
- 2 FLETCHER, J. E. et al. The selenocysteine incorporation machinery: interactions between the SECIS RNA and the SECIS-binding protein SBP2. **RNA**, v. 7, n. 10, p. 1442-1453, 2001.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

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



## PG184

# Two-component Landau liquid model for new state of matter

SERENONE, W. M.<sup>1</sup>; MENDES, T.<sup>1</sup>

willian.serenone@usp.br

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

The force responsible for binding protons and neutrons together in the atomic nucleus is the strong force, which is best described by Quantum Chromodynamics (QCD). QCD has a peculiar behavior: at small distances, its coupling constant becomes negligible. This is called asymptotic freedom. Conversely, at larger distances it becomes larger, giving rise to color confinement. Due to this behavior, perturbation theory is only possible in the very-high-energy limit. Non-perturbative calculations can be carried out using quantization through the path-integral formalism, analytic continuation to imaginary time and discretization of the resulting Euclidean space onto a lattice. The introduction of the lattice acts as a regulator of the theory, taming the usual infinities that arise in quantum field theories. The continuum limit must be taken with care not to reintroduce these, i.e. we must renormalize the theory. This is done by finding how the bare parameters of QCD depend on the lattice spacing. (1) Usually, this is done by the calculation of renormalization constants. One class of methods to calculate these constants is called Momentum Subtraction (MOM) scheme. In these methods, one imposes that the renormalized expectation value of an operator (e.g. a vertex function) at a given momentum is equal to its value computed at tree-level. (2) Our interest is to use these methods to compute the renormalization constant of some gauge-dependent quantities, like propagators and three-point correlation functions. As happens in Quantum Electrodynamics, the study of such quantities is fundamental in the understanding of QCD properties. Another goal is to compute the renormalization constant of the Energy-Momentum tensor and the tensor itself at high-temperature. The interest arises since experiments showed that at these temperatures, quarks and gluons (the fundamental particles carrying color charge) behave as a nearly perfect fluid. Also, this new state of matter probably existed in the primordial universe and, thus, knowing its properties has importance for cosmological studies. If one is able to compute the (renormalized) Energy-Momentum tensor and its self-correlation function, it is possible to verify if the quark-gluon plasma follows a variation of the Two-Component Landau Liquid Model. (3) Currently, we have code that is able to perform the lattice simulations and are testing and optimizing the code needed to perform the Energy-Momentum tensor measurements. The computations of the renormalization constants are left as a later step.

**Keywords:** Quantum chromodynamics. Monte Carlo simulations. Renormalization constants.

### Referências:

1 GATTRINGER, C.; LANG, C. **Quantum chromodynamics on the lattice**: an introductory presentation. Berlin: Springer, 2010. 343 p.

2 VLADIKAS, A. Three topics in renormalization and improvement. In: LELLOUCH, L. et al. **Modern**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

**perspectives in lattice QCD:** quantum field theory and high performance computing. New York: Oxford University Press, 2011. p. 161-222

3 CHERNODUB, M. N.; VERSHELDE, H.; ZAKHAROV, V. Two-component liquid model for the quark-gluon plasma. **Theoretical and Mathematical Physics**, v. 170, n. 2, p. 211-216, 2012. doi: 10.1007/s11232-012-0023-8.



## PG185

# Characterization of macromolecular interactions from *Escherichia coli* selenocysteine incorporation pathway

SERRÃO, V. H. B.<sup>1</sup>; FERNANDES, A. F.<sup>1</sup>; SCORTECCI, J. F.<sup>1</sup>; BASSO, L. G. M.<sup>2</sup>; HEEL, M. V.<sup>3</sup>; PORTUGAL, R. V.<sup>4</sup>; THIEMANN, O. H.<sup>1</sup>

vitor.serrao@usp.br

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

<sup>2</sup>Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

<sup>3</sup>Netherlands Centre for Electron Nanoscopy - LU

<sup>4</sup>Laboratório Nacional de Nanotecnologia - CNPEM

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 domains of life and is cotranslationally incorporated into 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 macromolecular interactions in Sec incorporation pathway are not completely known yet. (2) This pathway starts with the specific tRNA to Sec incorporation (tRNA<sup>Sec</sup>) charging with L-serine amino acid (L-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<sup>Sec</sup>, which is, incorporated into polypeptide chain in Ribosome after delivery by Specific Elongation Factor (SelB) with GTP consumption and SecIS/tRNA<sup>Sec</sup> recognition. (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<sup>Sec</sup> was formed, which was further corroborated by Transmission Electron Microscopy using negative stained and vitreous ice sample preparation, calorimetric measures by differential scanning calorimetry (DSC) and GTPase activity assays by High Performance Liquid Chromatography (HPLC). The binding constants between SelB.GTP.tRNA<sup>Sec</sup>, SelB.GTP.tRNA<sup>Sec</sup>.SelA, SelB.GTP.SecIS and SelB.GTP.tRNA<sup>Sec</sup>.SecIS suggest the sequence of events where the SelB.GTP complex would firstly be recognized by the binary complex SelA.tRNA<sup>Sec</sup> to release this specific tRNA and then, the tRNA<sup>Sec</sup> would be delivered to Ribosome for Sec incorporation into 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 interactions. Protein-RNA interactions.





### Referências:

- 1 TURNER, R. J.; WEINER, J. H.; TAYLOR, D. E. Selenium metabolism in *Escherichia coli*. **Biometals**, v. 11, n. 3, p. 223-227, 1998.
- 2 STADTMAN, T. C. Selenocysteine. **Annual Review of Biochemistry**, v. 65, p. 83-100, 1996. doi: 10.1146/annurev.bi.65.070196.000503.
- 3 FISCHER, N. et al. Towards understanding selenocysteine incorporation into bacterial proteins. **Biological Chemistry**, v. 388, n. 10, p. 1061-1067, 2007.

## PG186

# PIFLOW - projeto, simulação e implementação de um protótipo dataflow em FPGA

SILVA JUNIOR, J. T. da<sup>1</sup>; MATIAS, P.<sup>1</sup>; RUGGIERO, C. A.<sup>1</sup>

jtsjunior@usp.br

<sup>1</sup>Instituto 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, já não permitem que ganhos significativos possam ser 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 (*data-driven*) 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 mais de 50 núcleos físicos em um único *chip* (*Xeon Phi*, arquitetura *MIC*), oferecida conjuntamente com uma distribuição Linux, específica para o controle de todo esse potencial de computação paralela. Talvez um modelo computacional **MIMD** (Múltiplas Instruções, Múltiplos Dados) não convencional, possa ser uma alternativa mais viável para o controle dessa grande quantidade de núcleos de processamento, ao invés de deixar a carga do sistema operacional, ou do programador controlá-los explicitamente, como é feito no modelo de **Von Neumann** ainda utilizado nos dias atuais. O **Dataflow** é uma técnica utilizada para sistemas computacionais controlados 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 podem ser executadas sequencialmente são dispostas uma abaixo da outra. (1) O objetivo desse trabalho é seguir o desenvolvimento do protótipo intitulado como **PIFLOW**, desenvolvido no Instituto de Física de São Carlos. Esse protótipo foi desenvolvido com base na arquitetura da Máquina Dataflow de Manchester (**MDFM**), um processador que utiliza o paradigma do **Dataflow** e que já possui uma extensa referência na literatura, com isso, fornecendo um ponto de partida muito bem estabelecido. Uma das principais características da **PIFLOW** é seu caráter dinâmico, marcado pela utilização de um rótulo chamado Nome de Ativação, que permite a reutilização de informações para a execução paralela de operações como laços e recursividade por exemplo. A **MDFM** possui um formato bastante modular, onde cada módulo atua como um estágio de um *pipeline* e as fichas executadas nessa estrutura geram novas fichas subseqüente à ela. Dessa forma, por apresentar esse caráter circular, a estrutura da **MDFM** é comumente referenciada como anel.(2) Para a **PIFLOW**, bem como o era na **MDFM**, existe uma limitação para a quantidade de unidades funcionais ativas na estrutura da máquina. Na **PIFLOW**, essa limitação se dá pela quantidade de unidades lógicas presentes nas *FPGAs* utilizadas para a composição da estrutura. (3) Com isso, o presente projeto pretende utilizar o anel constituído na **PIFLOW** como uma unidade da nova estrutura, que irá disponibilizar diversas dessas unidades interligadas entre as suas vizinhas, dessa forma, garantindo um aumento considerável na quantidade de unidades funcionais ativas para a execução de programas.

**Palavras-chave:** Dataflow. FPGA. Paralelismo.



### Referências:

- 1 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.
- 2 SHARP, P. A. **Dataflow computing**: theory and practice. New York: Ablex Publishing Company, 1992. p. 375-392
- 3 KIRKHAM, C.C. The Manchester prototype dataflow system: basica programming. In: INTERNATIONAL REPORT UMCS-DF-BPM, 6th, 1987, Manchester. **Proceedings...** Manchester: University of Manchester, 1987.



## PG187

# Differential geometry and information theory application to protein conformational analyses

SILVA NETO, A. M.<sup>1</sup>; MONTALVÃO, R. W.<sup>2</sup>

amarinho@usp.br

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

<sup>2</sup>Pontifícia Universidade Católica - PUCRS

How to deal with protein flexibility is one of the major challenges of modern structural biology, one of reasons for it is the lack of a proper language to represent protein structure which is viable and convenient for computational analyses. In this project, we are exploring the possible usage of differential geometry descriptors and informational theory for protein conformational analyses. In the early stages of development, our implementation was able to identify significant changes on alpha-helix between states but was insensitive to less pronounced changes, such as loop motion. In the current stage of development, a new clustering strategy which is based on a per residue clustering was implemented. Here we present the initial results of the analyses of inter-domain motion and intrinsically unstructured proteins. In addition, we also report our attempts to establish a coding system for our differential geometry representation and apply information theory descriptors to explore protein conformational dynamics. The FoID and N(tail) Measle Nucleoprotein Ensemble (1) were used as a test case for interdomain motion and intrinsically unstructured proteins (IUPs), respectively. A bias-exchange metadynamics simulation using a pincer and a torsional angle as collective variables to represent the FoID conformational phase space and obtain a conformational ensemble which captures interdomain motion dynamics. An NMR based ensemble of N(tail) Measle Virus Nucleoprotein was obtained from the Protein Ensemble Database. The results of Fold indicates that its flexibility was underestimated and the simulation setup needs to be reviewed for a proper sampling, however the motion captured was suitable to test our method. The per residue clustering strategy implemented was able to propose a reasonable clustering solution for an entire fragment, even for a solution based on just one residue data. A limitation of current implementation is the need to provide the final number of clusters, we are working on possible algorithms to provide an estimation of the number of clusters per residue. The IUP analyses using differential geometry allow to identify helix formation regions and pockets of order and some unexpected patterns appears for the arc-length descriptor. This results indicates that our descriptors can be used to identify and explore IUPs protein dynamics, however the biological significance of those findings still needs to be explored. The letter coding system implemented captures spatial information and the conformational informational entropy allows to identify transitional and stable states without requiring any knowledge of the conformational phase space shape. Those results suggest that an informational theory approach for protein dynamics is possible. This creates the opportunity to study protein dynamics from a new perspective, for example, we can explore the application of methods, concepts and ideas related to communication theory to protein dynamics analyses.

**Palavras-chave:** Protein flexibility. Differential geometry. Informational theory.



### Referências:

1 OZENNE, V. et al. Mapping the potential energy landscape of intrinsically disordered proteins at amino acid resolution. **Journal of the American Chemical Society**, v. 134, p. 15138-48, 2012. doi: 10.1021/ja306905s.

## PG188

# Novas estratégias para o diagnóstico e tratamento de onicomicose por terapia fotodinâmica

SILVA, A. P.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; INADA, N. M.<sup>1</sup>

paulalsir@ursa.ifsc.usp.br

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

O termo onicomicose é derivado do grego *onyx* (unha) e *mykes* (fungo) e consiste numa doença que representa aproximadamente metade de todos os casos de infecção da unha.(1) O tratamento convencional consiste na administração de antifúngicos e antibióticos por longos períodos. O aumento de linhagens microbianas resistentes aos fármacos 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 fotossensibilizador (FS) ativado por luz em comprimento de onda adequado que, na presença de oxigênio, produz espécies reativas que inativam os micro-organismos.(3) O objetivo geral deste projeto é o de implementar a TFD como uma nova técnica para o tratamento da onicomicose. E os objetivos específicos são: analisar diferentes classes de FSs como curcuminas e clorinas; estudar mecanismos que auxiliam na penetração do FS na lâmina ungueal utilizando emolientes e novas formulações farmacêuticas; propor novas ferramentas para o diagnóstico em tempo real da doença (imagens termográficas e de fluorescência); realizar um estudo clínico multicêntrico para o tratamento dos pacientes com um dispositivo específico patentado para esta aplicação. Nos ensaios *in vitro*, testou-se variações de curcumina e clorinas. Realizou-se estudos fotofísicos como absorção e fluorescência e de inativação fotodinâmica dos principais micro-organismos envolvidos: *Trichophyton rubrum*, *T. mentagrophytes* e *Candida albicans*. A fonte de luz utilizada foi um equipamento contendo LEDs emitindo em 450 nm, intensidade 35 mW/cm<sup>2</sup>. Também foi analisada a estrutura da unha por microscopia eletrônica de varredura e microscopia confocal de fluorescência, após aplicação da uréia 40%. Outros mecanismos para auxiliar na penetração do FS na lâmina ungueal também foram avaliados, incorporando a curcumina em diferentes formulações (solução, gel e emulsão). Nos ensaios clínicos, imagens termográficas e de fluorescência foram realizadas para auxiliar no diagnóstico de onicomicose. Para o tratamento, utilizou-se um dispositivo com comprimento de onda em 450 nm e 100 mW/cm<sup>2</sup>, projetados anatomicamente para pés e mãos. Foi aplicado a curcumina (1,5 mg/mL) em solução, gel ou emulsão por 30 minutos e à seguir, as unhas são iluminadas por 20 minutos. Nova avaliação clínica é efetuada após 7 dias e o tratamento é realizado até alcançada a cura clínica. A curcumina apresentou melhores resultados na Inativação Fotodinâmica *in vitro*, quando comparada às clorinas. Entre as curcuminas testadas, o melhor resultado foi obtido pela mistura de curcumina e curcuminoides da empresa nacional PDTPharma®. As imagens termográficas e de fluorescência demonstraram ser complementares para diagnosticar as onicomicoses. Os resultados clínicos após o tratamento de 21 pacientes mostraram resposta completa com a média de dez sessões de TFD com curcumina em gel. Este número de sessões caiu para seis quando incorporada em emulsão. A eficácia da TFD com curcumina em gel ou emulsão foi melhor que os tratamentos convencionais. O baixo custo do equipamento e do FS, simplicidade de operação com resultados clínicos rápidos e a ausência de efeitos colaterais são fatores importantes que garantem a implementação desta tecnologia como um tratamento



ideal e o de escolha

**Palavras-chave:** Onicomicose. Terapia fotodinâmica. Curcumina.

**Referências:**

1 SMIJS, T. et al. . Photodynamic and nail penetration enhancing effects of novel Multifunctional Photosensitizers designed for the treatment of Onychomycosis.. **Photochemistry and Photobiology**, v. 90, n. 1, p. 189-200, 2014. doi: 10.1111/php.12196.

2 LEDON, J.A. et al. . Laser and light therapy for onychomycosis: a systematic review.. **Lasers in Medical Science** , v. 29, n. 2, p. 823-9, 2014. doi: 10.1007/s10103-012-1232-y.

3 BLANCO, K.C. et al.. Photodynamic therapy for the treatment of skin cancer in patients with idiopathic Thrombocytopenia: a case report. **Dermatoly Open Journal**, v. 1, n. 1, p. 27-29, 2016. doi: 10.17140/ DRMTOJ-1-108.



## PG189

# O KBDM como ferramenta para o processamento de dados clínicos de espectroscopia por ressonância magnética: LLC-KBDM

SILVA, D. M. D. D.<sup>1</sup>; PAIVA, F. F.<sup>1</sup>

danielomendes@usp.br

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

O formalismo de Fourier é uma descoberta matemática que tem sido muito importante na área de ressonância magnética. Como um bom exemplo entre as suas diversas aplicações dentro da técnica, a versão bidimensional da Transformada de Fourier possibilitou a obtenção de imagens. Devido à natureza linear da transformação, o espectro gerado é estável em relação às variações do sinal temporal, uma vez que o ruído no domínio do tempo é linearmente convertido para o domínio da frequência. Entretanto, em algumas aplicações, como é o caso da espectroscopia in vivo, a utilização da transformada de Fourier por si só não é suficiente. No processo de quantificação, é necessária a obtenção da área embaixo da curva de cada pico do espectro. Quando há sobreposição, isto é, quando os picos estão localizados em regiões do espectro muito próximas, não é possível medir diretamente cada uma das áreas separadamente. Esta situação é muito comum em dados clínicos de ressonância magnética. Para resolver este problema, é necessário ajustar o sinal em uma base ou em um modelo representado por um conjunto de funções lorentzianas, gaussianas ou de Voigt, por exemplo. O Krylov Basis Diagonalization Method, conhecido como KBDM, opera no domínio temporal e permite a obtenção paramétrica das linhas que formam o espectro utilizando o modelo de picos lorentzianos. (1) Entretanto, entre as suas limitações, está a alta sensibilidade à presença do ruído, cenário que também é comum em dados in vivo. Em sinais ruidosos, linhas adicionais são detectadas pelo algoritmo, sendo necessário filtrá-las, muitas vezes sem sucesso. Além disso, também ocorrem distorções nas linhas dos picos reais. No contexto deste trabalho, foram desenvolvidas algumas técnicas que permitem a obtenção de médias de múltiplas aplicações do KBDM a partir de um único sinal adquirido. O produto final é uma lista compacta de parâmetros. Este método foi denominado LLC-KBDM. Para tal, é explorado o fato de que, quando representados nas variáveis corretas, os parâmetros reais obtidos das múltiplas aplicações do KBDM se agrupam, enquanto que os artefatos tendem a ser dispersos. O centroide de cada agrupamento é utilizado como medida final da estimativa da cada parâmetro da respectiva linha. Estes parâmetros podem ser utilizados na reconstrução do sinal filtrado, isto é, sem a presença de ruído ou no processo de quantificação. As múltiplas aplicações são geradas a partir do processamento de troncamentos do sinal original. São estudados no escopo deste trabalho os efeitos do nível de ruído e da sobreposição na determinação do intervalo de truncamento. Resultados com dados que simulam a aquisição clínica de espectroscopia de cérebro humano em um equipamento 3T com a presença de ruído são apresentados. As técnicas desenvolvidas até o momento se mostraram suficientes para a continuidade do projeto, onde a próxima etapa é a aplicação do método em dados in vivo.

**Palavras-chave:** LLC-KBDM. KBDM. RM.





### Referências:

- 1 MANDELSHTAM, V. A. FDM: the filter diagonalization method for data processing in NMR experiments. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 38, p. 159-196, 2001.



## PG190

# Caracterização de um novo mecanismo de controle do regulador intracelular bacteriano c-di-GMP

SILVA, E. E. D.<sup>1</sup>; CARDOSO, A. R.<sup>1</sup>; MENEGHELLO, R.<sup>1</sup>; NAVARRO, M. V. A. S.<sup>1</sup>

everton.edesio@gmail.com

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

É essencial para sobrevivência que as bactérias sejam capazes de captar estímulos ambientais (como temperatura, nutrientes e substâncias agressivas) para alterar seu metabolismo. Entender molecularmente como isso ocorre pode levar a técnicas que bloqueiem ou mimetizem sinais ambientais de maneira que as bactérias se comportem a favor do homem. Como exemplo pode-se citar técnicas voltadas para o tratamento de infecções ou para aplicações em biotecnologia. Isso confere a importância do projeto, que trata de proteínas de membrana que possuem uma porção receptora de sinal externo e outra porção capaz de degradar (quando possui uma porção denominada EAL) ou produzir (quando presente um GGDEF) o di-GMP cíclico (c-di-GMP). Essa molécula por sua vez é descrita regulando em bactérias virulência e diversos elementos necessários para assimilação da forma isolada ou da forma colonial. Essa última possui maior resistência a eliminação e é conhecida como biofilme. (1) Apesar dessa importância poucos trabalhos tratam dos mecanismos de transmissão de sinal que controlam o c-di-GMP. Isso compõe outra motivação para o presente trabalho, que ainda usa como modelo de estudo proteínas dos importantes patógenos *Pseudomonas aeruginosa* e *Xanthomonas citri*. Nosso grupo de pesquisa trouxe em um trabalho anterior um resultado de duplo híbrido inédito, que apontou que as proteínas de *P. aeruginosa* codificadas nos genes PA0847 e PA3343 interagem. Ambas são sinalizadoras de sinais externos com um GGDEF cataliticamente competente. Nesse estudo vem sendo produzidos e estudados fragmentos da PA0847 a fim de caracterizá-la e identificar a região da interação. Foram realizados experimentos de *pull-down* com partes da PA0847 e PA3343 que, além de fornecer suporte, indicaram a dependência do c-di-GMP para interação. Ensaio enzimático mostraram que uma parte da PA3343 é capaz de inibir a PA0847 indicando que a função da interação seja regulatória. Geralmente é observado na literatura que a produção de c-di-GMP por uma proteína induz a formação de biofilme, entretanto foi visto que PA3343 é uma exceção a regra. (2) Uma possível explicação vem de estudos que defendem que o c-di-GMP produzido em uma parte da célula não colabora para uma concentração global celular (*pool* global) mas tem seu destino restrito (*pool* local). (3) A hipótese é a de que a interação entre PA0847 e PA3343 é um exemplo de controle por *pool* local. A parte estudada da PA3343 possui um padrão de aminoácidos encontrados em outras proteínas, que não se restringe apenas àquelas que envolvem sinalização por c-di-GMP. Isso ou pode ser o indício de um mecanismo mais amplo de sinalização ou um padrão específico de reconhecimento de c-di-GMP. Estão sendo produzidos mutantes no padrão de aminoácidos da PA3343 para elucidar essa questão. Planeja-se executar experimentos *in vivo* com *P. aeruginosa* com os genes referentes a PA3343 e PA0847 alterados para mostrar os impactos da interação para bactéria. Pretende-se ao final do trabalho concluir um mecanismo que explique a função e a interação entre PA3343 e PA0847 e que os detalhes moleculares desse mecanismo possam vir a ser aplicados em tecnologias de controle e eliminação bacteriana.



**Palavras-chave:** Sinalização bacteriana. C-di-GMP . Biofilme.

**Referências:**

1 HA, D. G.; O'TOOLE, G. A. C-di-GMP and its effects on biofilm formation and dispersion: a *Pseudomonas aeruginosa* review. **Microbiology Spectrum**, v. 3, n. 2, p. 1-12, 2015. doi: 10.1128/microbiolspec.MB-0003-2014.

2 KULASAKARA, H. et al. Analysis of *Pseudomonas aeruginosa* diguanylate cyclases and phosphodiesterases reveals a role for bis-(3-5)-cyclic-GMP in virulence. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 103, n. 8, p. 2839-2844, 2006. doi: 10.1073/pnas.0511090103.

3 MASSIE, J. P. et al. Quantification of high-specificity cyclic diguanylate signaling. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 109, n. 31, p. 12746-12751, 2012. doi: 10.1073/pnas.1115663109.

## PG191

# Desenvolvimento de drug delivery systems para o tratamento de câncer de pele não-melanoma associado à terapia fotodinâmica

SILVA, G. R.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; MASCARENHAS, Y. P.<sup>1</sup>; INADA, N. M.<sup>1</sup>

geisiane.silva@usp.br

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

O câncer de pele é uma das neoplasias malignas com a maior incidência no Brasil, o que corresponde a 25% dos casos de tumores registrados no país. (1) Os tratamentos para carcinomas incluem radio, quimioterapia ou intervenções cirúrgicas que embora eficazes, há vários efeitos colaterais como perda de funcionalidades normais dos órgãos e tecidos ou acúmulo de fármacos em tecidos saudáveis. (2) Assim, a Ciência busca novos tratamentos que auxiliem os já existentes de forma eficaz, um exemplo é a Terapia Fotodinâmica (TFD), técnica embasada na administração local de luz em conjunto com um fotossensibilizador (FS) e o oxigênio molecular presente nos tecidos. Quando estes fatores são combinados, geram espécies reativas (EROs) que destroem o tecido tumoral. As EROs causam efeitos citotóxicos como a morte celular via necrose, apoptose ou autofagia. (2) O ácido aminolevulínico (ALA) foi um dos primeiros fármacos fotossintéticos autorizado pela ANVISA para o tratamento com TFD. Este ativo é um precursor das porfirinas endógenas, as quais são sintetizadas na via da biossíntese da heme nas células. A absorção do excesso de ALA leva ao acúmulo e produção de protoporfirina IX (PpIX) e este age como FS. (3) No entanto, a eficácia da TFD é dependente do acúmulo de FS nos tecidos tumorais, após determinado tempo, o que pode desencadear alguns problemas como a falta de biodisponibilidade do fármaco e reações de fotobranqueamento, levando a limitações ao tratamento proposto. Devido suas características hidrofílicas, o ALA apresenta baixa penetração na epiderme e derme. As porfirinas (PpIX) são lipossolúveis e polares, de baixa massa molecular e tendem a se auto agregar em solução aquosa, diminuindo sua capacidade de produzir EROs. (3) Este trabalho tem por objetivo desenvolver um sistema para entrega controlada da molécula hidrofílica ALA, nanoencapsulando-a em matrizes de biopolímeros, como o poliácido-lático (PLA), visando melhorar a aplicação deste fármaco para tratamentos com TFD, para o câncer de pele do tipo não-melanoma. Espera-se, com o uso adequado da nanotecnologia, favorecer a entrega seletiva e específica do ALA às células neoplásicas mais profundas, reduzindo a auto agregação da PpIX, diminuindo os efeitos colaterais e aumentando a porcentagem de cura deste tipo de câncer. As nanopartículas serão caracterizadas quanto sua estabilidade (DRX, DLS, potencial Zeta), formação (MEV, AFM) e liberação controlada (análises térmicas). Os sistemas serão testados in vitro, em células de carcinoma epidermóide humano (A 431 ATCC CRL-1555), por citometria de fluxo para análise da morte celular (necrose/apoptose), produção de espécies reativas (radicais ânion superóxido, oxigênio singlete e outros) e cálcio citosólico. Imagens por microscopia de fluorescência confocal e tempo de vida de fluorescência (FLIM) serão realizadas para cinética de entrada do FS e sua localização intracelular. Ensaios com células de difusão de Franz serão realizados para os testes de liberação transdérmica.

**Palavras-chave:** Nanopartículas poliméricas. Terapia fotodinâmica. Câncer de pele não-melanoma.

**Referências:**



1 BRASIL. Ministério da Saúde. Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva. **Tipos de câncer:** pele melanoma. Disponível em: <[http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/tiposdecancer/site/home/pele\\_melanoma/definicao](http://www2.inca.gov.br/wps/wcm/connect/tiposdecancer/site/home/pele_melanoma/definicao)>. Acesso em: 15 jan. 2016.

2 PASSOS, S. K. et al. Quantitative approach to skin field cancerization using a nanoencapsulated photodynamic therapy agent: a pilot study. **Clinical, Cosmetic and Investigational Dermatology**, v. 6, p. 51-59, 2013. doi: 10.2147/CCID.S36758.

3 SHARMAN, W. M.; ALLEN, C. M.; LIER, J. E. Photodynamic therapeutics: basic principles and clinical applications. **Drug Discovery Today**, v. 4, n. 11, p. 507-517, 1999. doi: 10.1016/S1359-6446(99)01412-9.



## PG192

# Observação de coerência quântica invariante no tempo em sistemas de ressonância magnética

SILVA, I. A.<sup>1</sup>; SOUZA, A. M.<sup>2</sup>; GLASER, S.<sup>3</sup>; ADESSO, G.<sup>4</sup>; SOARES-PINTO, D. O.<sup>1</sup>; AZEVÊDO, E. R.<sup>1</sup>

isa.almeidasilva@gmail.com

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

<sup>2</sup>Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF

<sup>3</sup>Department of Chemistry - TUM

<sup>4</sup>School of Mathematical Sciences - University of Nottingham

Uma das principais assinaturas de um sistema quântico é a sua capacidade de sobreviver em uma situação de superposição de estados coerentes, o que representa um recurso importante e insubstituível para o desenvolvimento de tecnologias quânticas. No entanto, a interação destes sistemas com ambientes que provocam efeitos de decoerência geralmente destrói estas superposições de maneira rápida e irreversível (a menos que outros recursos sejam consumidos pelo sistema). No entanto, e surpreendentemente, foi recentemente previsto que, a coerência quântica (em relação a uma certa base de referência) permanece invariante durante um longo período de tempo em sistemas quânticos compostos expostos a ruídos quânticos tais como: *bit-flip*, *phase-flip*, *bit-phase-flip* e canal de depolarização. (1) Este fenômeno, denominado de congelamento (*freezing*) da coerência quântica ocorre para uma classe de estados quânticos denominada estados  $M_N^3$  (sigla da expressão em inglês *maximally mixed marginals* para estados de dimensão N), independentemente da medida utilizada para quantificar a coerência (o que pode ser feito utilizando-se medidas de entropia relativa ou medidas geométricas, desde que baseadas em métricas que satisfaçam certas condições de confiabilidade (2)). Esta universalidade da invariância da coerência foi experimentalmente comprovada para sistemas de 2 e 4 q-bits através de dois sistemas de ressonância magnética nuclear à temperatura ambiente. O primeiro deles corresponde à um sistema de spin nuclear 1/2, onde codifica-se os dois spins nucleares em  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  presentes na molécula de Clorofórmio marcado em carbono-13 ( $^{13}\text{CHCl}_3$ ). O experimento foi realizado em um espectrômetro VARIAN 500 MHz à temperatura ambiente. O segundo sistema codifica os 4 q-bits em spins nucleares 1/2 distintos presentes na molécula de  $^{13}\text{C}$  -  $^{15}\text{N}$  - dietil - (dimetilcarbamoil) florometilfosfonato (3), a saber:  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$  (para este experimento o  $^{15}\text{N}$ , spin nuclear presente na molécula e também ativo em RMN, foi desacoplado utilizando o método de onda contínua (*cw*)). O experimento foi realizado em um espectrômetro BRUKER AVIII 600 MHz, equipado com uma sonda de 6 canais (protótipo desenvolvido especialmente para a realização de experimentos em sistemas heteronucleares onde é possível controlar de maneira independente até 5 spins nucleares/q-bits). Demonstramos ainda que estados Bell diagonais podem ser utilizados sem perda de generalidade já que fornecem um limite inferior para a quantidade de coerência presente em sistemas mais gerais. Este estudo ainda aborda a relação entre coerência e outras formas de correlações quânticas, como medidas de discórdia, destacando-se a capacidade natural



de preservação de características quânticos em sistemas complexos.

**Palavras-chave:** Coerência quântica. Ressonância magnética nuclear. Decoerência.

**Referências:**

1 BROMLEY, T. R.; CIANCIARUSO, M.; ADESSO G. Frozen quantum coherence. **Physical Review Letters**, v. 114, n. 21, p. 210401-1-210401-6, 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.210401.

2 CIANCIARUSO, M. et al. Universal freezing of quantum correlations within the geometric approach. **Scientific Reports**, v. 5, p. 10177-1-10177-17, 2015. doi: 10.1038/srep10177.

3 MARX, R. et al. Engineering of an all-heteronuclear 5-qubit NMR quantum computer. **Magnetic Resonance in Chemistry**, v. 53, n. 6, p. 442-447, 2015. doi: 10.1002/mrc.4233.



## PG193

### Técnica para análise de fenômenos a tempo curto

SILVA, R. M.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

ramises.martins@gmail.com

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

Fenômenos que ocorrem a tempos curtos em sistemas quânticos abertos são caracterizados por possuírem um tempo característico de uma ordem muito menor que o tempo de relaxação do sistema. Como exemplos podemos citar o efeito de decoerência (1), que em resumo tenta explicar como a natureza quântica de um sistema é perdida ao longo da interação com o ambiente e o fenômeno de superradiância (2-3), onde estuda-se como alguns sistemas emitem um pulso energético muito rápido gerando um pico de intensidade fino localizado muito antes da relaxação do sistema. O objetivo desse trabalho é não só estudar esses fenômenos mas como apresentar uma técnica alternativa para a quantificação das medidas associadas e de seus tempos característicos. A técnica apresentada se baseia em fazer uma expansão perturbativa no tempo para o operador densidade a partir de uma equação mestra quântica e com seu uso calcular as medidas correspondentes a fenômenos que ocorrem a tempos curtos. A simplicidade da técnica e seu uso abrangente são os principais fatores motivadores deste trabalho.

**Palavras-chave:** Decoerência. Superradiância. Fenômenos a tempos curtos.

#### Referências:

- 1 KIM, J. I. et al. Perturbative expansion for coherence loss. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 2, p. 207-210, 1996.
- 2 PRATAVIERA, G. A.; MIZRAHI, S. S. Many-particle Sudarshan-Lindblad equation: mean-field approximation, nonlinearity and dissipation in a spin system. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 36, n. 4, p. 4303-1-4303-11, 2014.
- 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.





## PG194

# Determination of protein-protein complexes from sparse experimental data

SILVA, S. R.<sup>1</sup>; MONTALVÃO, R. W.<sup>2</sup>

samuelsilva@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - IFSC

<sup>2</sup>PUCRS

The great majority of cellular processes depend on the formation of transient or permanent macromolecular protein complexes. The biological function of proteins rely on its tridimensional structures and physical interaction with other molecules. Structural information about those complexes at low to intermediate resolution can be obtained through a range of experimental techniques. Nevertheless, 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 biological relevant conformation. Several computer programs have been developed for high-resolution protein-protein docking, with varying levels of prediction success. The objective of this project is to develop new computational approaches for determining the structures of protein-protein complexes using sparse experimental information. A new computer program is being developed to combine advanced geometric models with chemical shifts from NMR spectroscopy, EPR Double Electron-Electron Resonance and Cryo-Electron Microscopy to calculate the structures of complexes from the individual proteins. This system is a complement to the Chemical Shift based approach used by CamDock. (1) To help decrease the computational costs, molecular surfaces were initially represented as projections in spherical harmonics. (2) This approach has three main advantages. First one is compact representation, since only the projection coefficients need to be stored and manipulated, resulting in less memory usage. Second one is faster rotation than point cloud surfaces, which allow access to a vast number of protein orientations and, as such, many possible complex candidates. Third one is adjustable level of detail, permitting successive refinement of docking candidates. Although this representation is satisfactory, its computation is problematic due to an stage of spherical mapping, whose distortions decrease the quality of the final computed surface. An alternate representation, using 3D Zernike polynomials (3), which are themselves based on spherical harmonics, was found to more adequately reproduce the geometry of the input surface. Since it is richer in information than spherical harmonics, 3D Zernike requires fewer data to represent surfaces, resulting in faster computations. 3D Zernike surfaces do not require spherical mapping, allowing to correctly reproduce holes in the surface and eliminating the sensitivity to distortions in the mapping. Surfaces in 3D Zernike showed high fidelity to the original surfaces. It is planed 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. Is is expected that the use of complementary experimental data will allow improvements in the quality of protein-protein modelling.



**Keywords:** Protein docking. Bioinformatics. High performance computing.

**Referências:**

1 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.

2 DUNCAN, B. S.; OLSON, A. J. Approximation and characterization of molecular surfaces. **Biopolymers**, v. 33, n. 2, p. 219-229, 1993.

3 CANTERAKIS, N. **3D zernike moments and zernike affine invariants for 3D image analysis and recognition**. Disponível em: <<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download;jsessionid=75E5B782DE5159A5DC65D2E80E1E6502?doi=10.1.1.16.3441&rep=rep1&type=pdf>>. Acesso em: 24 ago. 2016.



## PG195

# Processamento de imagens aplicado ao estudo de gases quânticos degenerados

SMAIRA, A. de F.<sup>1</sup>; TELLES, G. D.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

andre.smaira@usp.br

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

Nosso grupo vem aplicando e desenvolvendo, em laboratório, uma técnica de geração de vórtices multi-carregados em superfluido atômico, baseada na imposição controlada de campo magnético homogêneo. (1) Além disso, no passado recente, nosso grupo de pesquisa produziu vórtices, turbulência e subsequente fragmentação do superfluido aplicando campos magnéticos alternados à condensados bosônicos.(2) A investigação destes sistemas é feita através de análise de imagens de expansão dos condensados perturbados resultantes (3), obtidas após a aplicação do campo magnético, através da técnica de absorção óptica de um feixe laser pela nuvem depois de um determinado intervalo temporal, chamado tempo-de-vôo. De fato, já se realiza algum processamento e análise básicos, porém há a necessidade do desenvolvimento de algoritmos mais elaborados e interessantes, capazes de extrair das imagens do sistema outras propriedades fundamentais e de grande interesse, tais como o perfil de densidade tridimensional, a distribuição de momentos, flutuações de densidade, correlações, número e propriedades dos vórtices, além de permitir o cálculo de outras expressões teóricas importantes para a classificação da turbulência, o cálculo de grandezas termodinâmicas e relações entre essas grandezas nas condições experimentais e resultados obtidos em nosso sistema. Nesse cenário, vimos desenvolvendo uma biblioteca de algoritmos e códigos capazes de analisar e extrair as propriedades acima citadas, fundamentais para o contínuo desenvolvimento e aperfeiçoamento das pesquisas na área de gases quânticos degenerados viabilizando a descoberta de novos resultados.

**Palavras-chave:** Condensado de Bose-Einstein. Matéria condensada. Átomos ultra-frios.

### Referências:

1 ALLEN, A.J. et al. **Twisted unwinding of multi-charged quantum vortex and generation of turbulence in atomic Bose-Einstein condensates.** Disponível em:<arXiv:1306.0782[cond-mat.quant-gas]>. Acesso em: 29 ago.2016..

2 BAGNATO, V.S.; YUKALOV, V.I.. **From coherent modes to turbulence and granulation of trapped gases.** Disponível em:<arXiv:1306.0782[cond-mat.quant-gas]>. Acesso em: 29 ago. 2016..

3 SZCZEPKOWSKI, J.et al.. Analysis and calibration of absorptive images of Bose-Einstein condensate at nonzero temperatures. **Review of Scientific Instruments**, v. 80, n. 5, p. 053103, 2009.



## PG196

# Efeitos coletivos nos processos de interação radiação-matéria: superátomos, superradiância e superabsorção

SOARES, P. M.<sup>1</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

pmssoares02@gmail.com

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

Conceitualmente, todo sistema físico com características de superradiância (1) pode apresentar o fenômeno oposto: superabsorção. A tendência natural é que as excitações presentes na amostra sejam transferidas para os infinitos graus de liberdade do reservatório térmico num processo irreversível. Logo, explorar a absorção de excitações térmicas é uma tarefa difícil, já que devido às flutuações do vácuo, a emissão sempre predomina durante a dinâmica incoerente. Os estados de Dicke, apropriados para descrevê-la, formam uma escada de níveis energéticos igualmente espaçados pelos quais o sistema atômico transita. Entretanto, nenhuma das transições nela existentes é privilegiada pelos modos do reservatório, impossibilitando que este acesse apenas uma delas em particular. Num trabalho recente, apresentado em 2014 (2), K. D. B. Higgins e colaboradores elaboraram um mecanismo de controle incoerente de uma dada transição coletiva, viabilizando a superabsorção. Ao posicionar íons numa estrutura circular, introduz-se à dinâmica livre a interação dipolo-dipolo entre primeiros vizinhos, que de forma perturbativa discrimina cada uma das transições. Somado à isso, exige-se um reservatório térmico de espectro estreito e centrado na frequência que favorece a transição alvo, evitando-se que as demais sejam acionadas. Basta ajustar a temperatura do reservatório para a dada transição, e efetivamente produzir um sistema de dois níveis que superabsorve excitações térmicas. Este resultado amplia os conhecimentos sobre a superradiância e fornece novas perspectivas. A seletividade de estados de Fock (3), possui notória analogia com que foi anteriormente. Obtida por meio da engenharia de interações, a seletividade consiste em restringir o sub-espaço dos estados do campo, de forma que apenas dois consecutivos apresentem população não nula. Aplicado aos estados de Dicke, este conceito viabilizaria o super-átomo: um sistema de dois níveis efetivo que preserva as características coletivas de origem, e interage com o modo do campo de radiação. Já o trabalho sobre geração de estados de Fock estacionários via engenharia de reservatórios, tornaria-se o ponto de partida para a proteção de emaranhados coletivos. Como na superradiância e na superabsorção, em que uma amostra atômica comporta-se como um único átomo via correlação entre seus momentos de dipolo, o objetivo do projeto é a engenharia de um Hamiltoniano de interação entre uma amostra atômica e um modo do campo de radiação em que a amostra atue como um único átomo, ou por assim dizer, um superátomo.

**Palavras-chave:** Superradiância. Engenharia de reservatórios. Engenharia de interações.

### Referências:

1 DICKE, R. H. Coherence in spontaneous radiation processes. **Physical Review Letters**, v. 93, n. 1, p. 99-110, 1954.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

2 HIGGINS, K. D. B. et al. Superabsorption of light via quantum engineering. **Nature Communications**, v. 5, p. 4705-1-4705-7, 2014. doi: 10.1038/ncomms5705.

3 PRADO, F. O. et al. Engineering selective linear and nonlinear Jaynes-Cummings interactions and applications. **Journal of Physics B**, v. 46, n. 20, p. 205501-1-205501-10, 2013.



## PG197

# Energy shift in QD levels induced by interaction with SPPs

SOBREIRA, F. W. A.<sup>1</sup>; MAREGA JUNIOR, E.<sup>1</sup>; PEREIRA, R. G.<sup>1</sup>

fwellysson@gmail.com

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

The recent interest in Surface Plasmon Polaritons (SPPs) has grown since the work by Ebbesen (1) that reported an Extraordinary Optical Transmission of light when crossing a regular array of holes fabricated in a thin metallic film. One of the focuses of this work was the study of light to develop novel devices based on photonics. As a result it was observed a strong coupling of light with SPPs and the possibility of manipulating light below the diffraction limit, the main subject of a new area so forth named Plasmonics. As a result of these studies, the interaction of SPPs with semiconductor quantum emitters has proved to be an important decay channel that can lead to non-trivial effects on the propagation of SPPs and excitation of these quantum emitters, such as a modification in the photoluminescence (PL) spectra. Although the interaction of SPPs with semiconductors is important both in the technological and academic point of view, there is a large discussion on the literature about the mechanisms to explain this interaction. We propose a methodology with which we are capable to tune the excited energy level of an exciton by placing InAs/GaAs quantum dots (QDs) near a metallic array of slits fabricated onto a thin metallic gold (Au) film. By changing the position over the slit where the SPPs are excited we are able to select which of the energy levels in the QDs are excited. To do this we used a micro-PL system and obtained the PL spectra for a sample of QDs at the temperature of 70K. We also propose and analyse a hamiltonian for the interacting system and explain an observed energy shift in the ground state level of the exciton in the QD due to the strong interaction with the SPP. We show that the strong electromagnetic field and the increase in the local density of states induced by the SPPs over the exciton are the responsible mechanisms for the modification in the PL spectra. These results are of great importance for applications of plasmonics in quantum optics as well as establishing a new platform for the study strongly interacting systems in condensed matter physics.

**Keywords:** Plasmonics. Quantum dots. Strong interaction.

### Referências:

1 EBBESEN, T. W. et. al. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, v. 391, n. 6668, p. 667-669, 1998. doi: 10.1038/35570.



## PG198

# Organic metal-insulator-semiconductor capacitors based on spin-coated P3HT-PVP films for sensing applications

SOUSA, M. A. M.<sup>1</sup>; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.<sup>1</sup>

marcos.moura.fis@gmail.com

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

Field-effect devices used to detect and identify biomolecules have been proposed as an alternative to devices such as electrolyte-insulator-semiconductor (EIS) systems with electrochemical measurements for biosensing. Most of this technology is based on silicon which makes the device fabrication expensive. (1) With organic electronics, however, one may now produce field-effect devices, e.g. field-effect transistors (FET), and metal-insulator-semiconductor (MIS) capacitors, at potentially much lower cost. In the present study, we analyze organic MIS capacitors to replace conventional silicon chips. The capacitive MIS structure has polythiophene (P3HT) as semiconductor and poly(4-vinylphenol) (PVP) as insulating layer. This structure was deposited on indium-tin-oxide (ITO) substrates using the spin-coating technique followed by thermal treatment to eliminate solvents. ITO electrode contacts were designed by photolithography process. The final structures were completed with a gold layer by vacuum thermal evaporation with deposition speed of 0.5 Å/s. Different solvents and spin-coating rotation speed for PVP were used to optimize the insulating film on the semiconductor, and the layers thickness was measured with a profilometer. Crosslinking in PVP films promoted a substantial reduction of thickness while the P3HT layer remained with the same thickness even after an annealing process. The capacitors were analyzed using capacitance-voltage (CV) measurements and compared with silicon MIS curves. The data analysis provided important information about depletion capacitance and flat-band voltage of such devices. For example, an effect was observed of charges accumulated on the CV curve in the first measurement, in a behavior that was recovered after some time. The approach introduced here is interesting for MIS fabrication since p-type semiconductors can be obtained in a very simple fashion. This improved understanding paves the way for the fabrication of organic EIS devices, and our next aim is to embed biomolecules for a complete biosensing characterization.

**Keywords:** Field-effect devices. Organic MIS. Biosensor.

### Referências:

1 SIQUEIRA JUNIOR, J. R. 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.



## PG199

# Desenvolvimento de modelos farmacofóricos para inibidores não covalentes da cruzaina

SOUZA, A. S.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, M. T.<sup>2</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

anacletoasilvadesouza@gmail.com

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

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

A doença de Chagas é classificada pela Organização Mundial da Saúde (OMS) como uma doença tropical negligenciada (DTN). A parasitose é causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi* e afeta cerca de 8-10 milhões de pessoas no mundo, sendo endêmica em países da América Latina, onde mais de 100 milhões de pessoas vivem em áreas de risco.(1) Embora a doença tenha sido descrita a mais de um século pelo cientista brasileiro Carlos Chagas, apenas dois fármacos estão disponíveis no tratamento da doença: o nifurtimox e o benzonidazol. Esses fármacos apresentam problemas sérios, como baixa eficácia, principalmente na fase crônica da doença, e severos efeitos colaterais além de resistência. Portanto, torna-se urgente a busca por novos fármacos que possuam um perfil mais adequado para a terapia da doença. A cruzaina (EC 3.4.22.51) é a cisteína protease mais importante para o parasito sendo expressa durante todo seu ciclo de vida. A enzima possui diversas funções fisiológicas, dentre outras, nutrição, reprodução e evasão das células imunológicas do hospedeiro.(2) Assim, a cruzaina tem sido considerada um dos alvos mais promissores no desenvolvimento de novos fármacos para a doença de Chagas. Diante desse cenário, esse estudo tem como objetivo o desenvolvimento de relações quantitativas entre a estrutura e atividade (QSAR, *Quantitative Structure-Activity Relationship*), com vistas ao desenvolvimento de hipóteses farmacofóricas para inibidores não covalentes da cruzaina. Os resultados são de uma série de derivados oxadiazólicos e glicolâmídicos com atividade anti- *T. cruzi*. As estruturas 3D foram construídas e buscas conformacionais utilizando água como solvente foram realizadas para obtenção de estruturas de mínima energia. Para a obtenção das hipóteses farmacofóricas, utilizou-se um algoritmo genético com atribuição linear para a função de alinhamento hiper molecular. Esse algoritmo se baseia na formação de uma ampla amostragem conformacional de cada um dos inibidores seguido de alinhamento molecular e atribuições farmacofóricas. Em seguida, as estruturas foram alinhadas e alocadas em uma grade virtual reticulada, e realizado uma análise comparativa dos campos moleculares (CoMFA, *Comparative Molecular Fields Analysis*).(3) Esse método utiliza o princípio de que as interações intermoleculares regem a propriedade alvo. A partir do potencial de van der Waals e de Coulomb, são calculadas as energias de interação entre uma sonda virtual (carbono sp<sup>3</sup>, +1) e os átomos das moléculas do conjunto de dados (descritores moleculares). O método dos mínimos quadrados parciais (PLS, *Partial Least Square*) correlacionou os descritores moleculares e a atividade biológica, gerando os modelos 3D, que apresentaram uma alta capacidade de correlação interna com e sem validação cruzada ( $q^2$  e  $r^2$  de 0,77 e 0,93, respectivamente) e externa ( $r^2_{pred}$  de 0,82). Esse modelo estatístico gerou mapas de contorno 3D, que nos permitiu uma análise visual de características moleculares que determinam alterações na propriedade alvo. Esses mapas revelam regiões onde alterações dos substituintes podem resultar em moléculas com atividades biológicas otimizadas. Portanto, as informações extraídas das características





farmacofóricas, dos mapas de contorno 3D e modelos preditivos poderão direcionar a descoberta de novas entidades químicas.

**Palavras-chave:** Doença de Chagas. Farmacóforo. CoMFA.

**Referências:**

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Chagas disease (American Trypanosomiasis)** . Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs340/en/index.html>>. Acesso em: 15 ago. 2016.

2 DOYLE, P. S. et al. . The Trypanosoma cruzi protease cruzain mediates immune evasion. **PLoS Pathogens** , v. 7, n. 9, p. e1002139, 2011. doi: 10.1371/journal.ppat.1002139.

3 KIM, K. H.; GRECO, G.; NOVELLINO, E. A critical review of recent CoMFA applications. In: KUBINYI, H. et al. **3D QSAR in drug design**. Netherlands: Springer, 1998. v.3. p. 257-315



## PG200

# Structural biology and medicinal chemistry studies toward the discovery of new *Plasmodium falciparum* enolase inhibitors

SOUZA, G. E.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

guilherme.eduardo.souza@usp.br

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

Malaria is a global public health problem with high mortality rates. In Brazil, malaria has a tremendous impact, where nearly 500,000 new cases per year are reported. (1) In this scenario, new therapeutic alternatives with innovative mechanism of action are extremely needed. Glycolytic enzymes play important roles in *Plasmodium* biology. Intra-erythrocytic stages of *P. falciparum* lack the functional tricarboxylic acid cycle and rely solely on glycolysis for their energy requirements. Enolase (EC 4.2.1.11) catalyses the reversible interconversion of 2-phosphoglyceric acid to phosphoenolpyruvic acid and was found to be associated with nucleus, food vacuole, cytoskeleton, plasma membrane and invasion process, thereby exhibiting moonlighting functions. Therefore, Pf-eno is an attractive and validated target for antimalarial drug development. (2) The aim of this project is to develop new promising compounds for the treatment of malaria by optimizing lead compounds, with appropriate activity and safety profiles. The lead compounds were discovered by screening the "Malaria Box" collection against *P. falciparum* enolase (Pfen) enzyme in a standardized target-based assay. The screening identified 50 compounds as promising inhibitors of Pfen. The evaluated IC<sub>50</sub> values for the most potent compounds were in the low micromolar range. Among the top active compounds, the quinoline (MMV000570) and the benzoimidazole (MMV666607) derivatives look very attractive for further optimizations. State of the art methods and strategies in structural molecular biology and medicinal chemistry will be employed in the design of improved leads through the integration of organic synthesis, SAR studies and structure-based drug design approaches. (3) The compounds will be evaluated in standard biological assays against the target enzyme and to guide the design of new derivatives, crystal structures of ligand-protein complexes will be obtained.

**Keywords:** Malaria. Enolase. *Plasmodium falciparum*.

### Referências:

1 FLANNERY E. L.; CHATTERJEE, A. K.; WINZELER E. A. Antimalarial drug discovery - approaches and progress towards new medicines. **Nature Reviews in Microbiology**, v. 11, n. 12, p. 849-862, 2013. doi: 10.1038/nrmicro3138.

2 MALUF, F. V. **Estudos estruturais e de química medicinal aplicados às enzimas da via glicolítica de protozoários:** enolase de *Plasmodium falciparum* e gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase de *Trypanosoma cruzi*. 2015. 151p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 DUFFY, S.; AVERY, V. M. Development and optimisation of a novel anti-malarial imaging assay validated for High Throughput Screening. **American Journal of Tropical Medicine and Hygiene**, v. 86, n. 1, p. 84-92, 2012. doi: 10.4269/ajtmh.2012.11-0302.



## PG201

# Planejamento de novos inibidores da enzima cruzaina candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas

SOUZA, M. L. de<sup>1</sup>; FERREIRA, R. S.<sup>2</sup>; REZENDE, C.<sup>3</sup>; CHAVEZ, R.<sup>3</sup>; DIAS, L. C.<sup>3</sup>; KROGH, R.<sup>1</sup>; AGUIAR, C.<sup>1</sup>; CRUZ, F.<sup>1</sup>; OLIVA, G.<sup>1</sup>; ANDRICOPULO, A. D.<sup>1</sup>

marianalaureano@gmail.com

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

<sup>2</sup>Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG

<sup>3</sup>Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

A enzima cruzaina, principal cisteína protease do *Trypanosoma cruzi*, é um alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de novos medicamentos antichagásicos por ser essencial ao parasita.<sup>(1)</sup> No intuito de desenvolver novos inibidores da cruzaina, utilizamos neste trabalho, uma abordagem multidisciplinar onde empregamos estratégias de SBDD (*Structure Based Drug Design*) integrando o uso de métodos computacionais e experimentais de química medicinal. <sup>(2)</sup> O planejamento e otimização molecular de inibidores da enzima cruzaina se deu a partir de um composto líder que foi identificado a partir de uma triagem virtual da base de dados (*fragment-like*) disponível no ZINC, e apresentou inibição do tipo reversível e competitiva. Análogos foram planejados, sintetizados e avaliados contra a cruzaina, permitindo o estabelecimento de estudos das relações entre a estrutura e a atividade (SAR). Foram realizadas modificações nas três porções da molécula, a porção fenóxi, o linker entre os anéis aromáticos e o heterociclo. Substituições da metila por halogênios resultaram em inibidores mais potentes, com exceção do flúor que apresentou um valor equivalente ao composto líder. Grupos mais volumosos nessa posição também aumentaram a potência dos inibidores, sendo que a substituição do fenóxi por 1-bromo-2-alcoxi resultou no composto mais potente da série (IC<sub>50</sub> = 0,12 μM). Substituições do grupo éter por uma amina aumentou a potência do inibidor (IC<sub>50</sub> = 0,52 μM), já a substituição por amida mostrou uma diminuição na potência (IC<sub>50</sub> = 6,24 μM). A substituição do imidazol por outros heterocíclicos resultou em compostos inativos, com isso, podemos concluir que o imidazol nessa posição é essencial para a atividade do composto. Assim como o composto líder, os novos compostos mantêm o mecanismo de inibição do tipo competitivo em relação ao substrato da enzima. Os resultados obtidos da descrição de SAR e a informação estrutural disponível para o alvo molecular, estimulam o contínuo desenvolvimento desta série de inibidores como candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas. Esses compostos estão sendo testados contra culturas de células humanas infectadas com parasitas para avaliar sua atividade anti-*T. cruzi* e também em culturas de células humanas saudáveis para analisar a seletividade desses inibidores. Estudos estruturais para caracterizar novos complexos cruzaina-inibidor, bem como ensaios biológicos contra o parasita *T. cruzi*, estão em desenvolvimento em nosso laboratório.

**Palavras-chave:** Cruzaina. *Trypanosoma cruzi*. Doença de Chagas.



### Referências:

1 CAZZULO, 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. doi: 10.2174/1381612013397528 .

2 FERREIRA, R. S. et al.. Synthesis, biological evaluation, and structure activity relationships of potent noncovalent and nonpeptidic cruzain inhibitors as anti-*Trypanosoma cruzi* agents. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 57, n. 6, p. 2380 - 2392, 2014.



## PG202

# Pulse width dependency of nonlinear refractive index in gaseous samples

SOUZA, T. G. B.<sup>1</sup>; MISOGUTI, L.<sup>1</sup>

tiago.gualberto.souza@usp.br

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

By and large, characterization of the nonlinear refractive index ( $n_2$ ) of gaseous samples has become important and important, mainly when a propagation dynamic of an ultrafast pulses through a transparent media is considered. (1) The  $n_2$  effect in pulse propagation could lead to temporal chirping and broadening of the pulse, as well as spatial beam self-focusing. For some applications the  $n_2$  effect is desirable, as the Kerr-lens mode-locked Ti:sapphire oscillators, whereas in other it does not, as the long distance high power field propagation. There are several ways used to estimate samples  $n_2$ , among than multi-beam methods such as four wave mixing, spectral interferometry, and so on. In contrast, there are also single-beam ones, which simpler but less accurate, such as Z-scan and Nonlinear Ellipse Rotation (NER). The latter has been explored in our work. Recently, our team has succeeded in employ the NER technique to probe materials  $n_2$  more efficiently, with the benefit of being able to control the pulse width of the incoming pulse. The improvement in NER technique has consisted in adding a rotating polarized and a dual phase lock-in amplifier to the experimental set up, which made the measurement faster and easier. (2) In this way NER measurements were performed in atmospheric components of the air: nitrogen ( $N_2$ ), oxygen ( $O_2$ ), argon (Ar), helium (He) and the mixture of them in the air itself. The experimental setup, developed to quantify the rotation angle ( $\alpha$ ) of the elliptical polarization axis, consists in transmitting throughout sample an amplified femtosecond Ti:sapphire laser beam (800 nm and 1 kHz). The gases nonlinearities are usually weak, due to its low densities, consequently making them difficult to measures. This problem were overcome by confining the samples within a hollow fused silica capillary, 150  $\mu\text{m}$  of internal diameter, in which the samples could be isolated and confined with a pressure control. Sweeping the pulse temporal width range allowed (from 60 fs up to 3 ps) for the laser pair of gratings compressor, the NER signal has shown to increase for longer pulses and reaching in a plateau. In fact, the curve obtained is the dynamical change of samples  $n_2$  between pure electronic to nuclear and orientational contributions. (3) In addition we have been also investigating the electric susceptibilities tensor elements related with that dynamics.

**Keywords:** Nonlinear optics. Refractive index. Ultrafast pulses.

### Referências:

- 1 BERGE, L. et al. Ultrashort filaments of light in weakly ionized, optically transparent media. **Reports on Progress in Physics**, v. 70, n. 10, p. 1633, 2008.
- 2 MIGUEZ, M. L. et al. Accurate measurement of nonlinear ellipse rotation using a phase-sensitive method. **Optics Express**, v. 22, n. 21, p. 25530, 2014.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 ZAHEDPOUR, S.; WAHLSTRAND, J. K.; MILCHBERG, H. M. Measurement of the nonlinear refractive index of air constituents at mid-infrared wavelengths. **Optics Letters**, v. 40, n. 24, p. 5794, 2015.



## PG203

### Avaliação termográfica de lesões cutâneas

STRINGASCI, M. D.<sup>1</sup>; SALVIO, A. G.<sup>2</sup>; SBRISSA NETO, D.<sup>1</sup>; VOLLET FILHO, J. D.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>; KURACHI, C.<sup>1</sup>

mirianstringasci@gmail.com

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

<sup>2</sup>Fundação Hospital Amaral Carvalho

O câncer de pele é o tipo de câncer com maior incidência no mundo. (1) Seu diagnóstico requer um médico especialista, com experiência em discriminação de lesões cutâneas. A termografia é uma técnica não invasiva que é completamente segura para os seres humanos. (2-3) Para este estudo, as imagens térmicas de lesões clinicamente semelhantes foram registradas e analisadas com o objetivo de proporcionar um método não invasivo para a discriminação entre os pares: carcinoma basocelular e nevo intradérmico; carcinoma espinocelular e queratose actínica; e melanoma e queratose seborreica pigmentada. Queratoses actínica e carcinomas espinocelular mostraram temperaturas distintas nas imagens, enquanto que os outros pares de lesões apresentaram temperatura semelhante entre si na região da lesão. No entanto, as lesões benignas apresentaram maior definição das bordas se comparadas com as lesões malignas. As imagens térmicas foram analisadas usando uma rotina MATLAB® para avaliar várias métricas (como entropia, média e desvio) de cada imagem, e uma rede neural foi usada para discriminar as lesões com base nesses valores de métricas. Os resultados mostraram que as redes neurais têm uma grande capacidade para a discriminação de lesões clinicamente semelhantes utilizando as imagens térmicas, o que sugere que a termografia pode ser usada como uma ferramenta complementar no diagnóstico de lesões malignas cutâneas.

**Palavras-chave:** Termografia. Lesões cutâneas. Diagnóstico.

#### Referências:

- 1 REZZE, G. G. et al.. Dermoscopy: the pattern analysis. **Anais Brasileiro de Dermatologia**, v. 81, n. 3, p. 261-268, 2006.
- 2 KENNEDY, D. A.; LEE, T.; SEELY, D.. A comparative review of thermography as a breast cancer screening technique. **Integrative Cancer Therapies**, v. 8, n. 1, p. 9-16, 2009. doi: 10.1177/1534735408326171.
- 3 SHADA, A. L. et al. . Infrared thermography of cutaneous melanoma metastases. **Journal of Surgical Research**, v. 182, n. 1, p. e9-e14, 2013. doi: 10.1016/j.jss.2012.09.022.





## PG204

# Photoactivated release of silver nanoparticles for bacterial control

SUÁREZ BALLESTEROS, C. A.<sup>1</sup>; CORREA, D.<sup>2</sup>; ZUCOLOTTO, V.<sup>1</sup>

carturosuarez@gmail.com

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

<sup>2</sup>Embrapa Instrumentação - CNPDIA

Smart nanomaterials may be activate under specific conditions/stimuli such as the interaction with electromagnetic radiation, biomolecules, among others. (1-2) We prepared a novel type of nanocapsule by using cross-linking methods between functional groups of Aniline (A) and Chitosan (CS) (A-CS). The A-CS nanocapsules have interesting antibacterial, degradable, conductive and photodegradable properties. Experimentally, the nanocapsules had been prepared by chemical reduction of the A-CS solution, which promoted protonated amine (-NH<sub>3</sub><sup>+</sup>) in A that attached by hydrogen bonds with the OH groups from CS forming the A-CS Nanocapsule. The protonated amine (-NH<sub>3</sub><sup>+</sup>) in CS generate a strong electrostatic repulsion which chelate silver ions to form silver nanoparticles (Ag Nps) inside of the Nanocapsule (Ag Nps-nanocapsules). The Ag-containing A-CS nanocapsules were able to release Ag Nps when a 405 nm line LASER diode (32 mW/cm<sup>2</sup>) was applied in the Ag Nps-nanocapsule solution. The LASER excites the surface plasmon resonance (SPR) of Ag Nps (405nm). Thereby the electronic energy vibration resulting from the SPR interacts with the cross-links in the A-CS nanocapsules, breaking their hydrogen bonds and allowing Ag Nps to be release. Clinical Laboratory Standard (CLSI) protocols were used to determine the minimum inhibitory concentration (MIC) value of the Ag Nps released against Gram-positive (*Staphylococcus aureus* ATCC 25923 ) and Gram-negative (*Escherichia coli* ATCC 25922) microorganisms. The antibacterial effect was also investigated by AGAR diffusion technique using the same microorganisms, with  $1.78 \pm 0.49$  mm and  $2.58 \pm 0.28$  mm of inhibition for E.coli and S.aureus respectively. On both techniques, a LASER was applied to the system and Ag Nps were released on the nanofiber surface

**Keywords:** Smart nanomaterials. Nanocapsules. Ag Nanoparticles.

### Referências:

1 KWON, E. J.; LO, J. H.; BHATIA, S. N. Smart nanosystems: bio-inspired technologies that interact with the host environment. **Proceedings of the National Academy of Sciences** , v. 114, n. 42, p. 14460-14466, 2015. doi: 10.1073/pnas.1508522112.

2 RIZZELLO, L.; POMPA, P. P. Nanosilver-based antibacterial drugs and devices: mechanisms, methodological drawbacks, and guidelines. **Chemical Society Reviews**, v. 43, n. 5, p. 1501-1518, 2014. doi: 10.1039/c3cs60218d.



## PG205

# Influence of energy structure on recombination lifetime in GaAs/AlGaAs multilayers

TAVARES, B. G. M.<sup>1</sup>; TITO, M. A.<sup>1</sup>; PUSEP, Y. A.<sup>1</sup>

belarmino@ifsc.usp.br

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

The processes of recombination of the photoexcited electron-hole pairs were studied in GaAs/AlGaAs weakly coupled multiple quantum wells, where the photoluminescence emission was composed of the contributions from the  $\Gamma - \Gamma$  and  $\Gamma - X$  conduction band minibands. Remarkable enhancement of the recombination time was observed when the magnetic field caused depopulation of the higher energy  $\Gamma - X$  miniband. The observed effect is attributed to the magnetic field induced variation of the electron density of states. As expected, the increasing magnetic field causes a narrowing of the PL lines due to quantization of the electron energy into Landau levels. (1) These results demonstrate magnetic field induced modification of the energy structure of the conduction band states participating in recombination processes. Two conduction band minibands contribute to the recombination in low magnetic field, while in the magnetic field higher than 6T, the electrons residing in one miniband recombine with the holes. The observed change in the miniband energy structure should result in the corresponding variation of the recombination time  $\tau$  determined according to the Fermi golden rule. (2)

**Keywords:** Recombination. Multiple quantum well. Photoluminescence.

### Referências:

1 KIOUPAKIS, E. et al. Temperature and carrier-density dependence of Auger and radiative recombination in nitride optoelectronic devices. **New Journal of Physics**, v. 15, n. 12, p. 5006, 2013. doi: 10.1088/1367-2630/15/12/125006.

2 HADER, J.; MOLONEY, J. V.; KOCH, S. W. Suppression of carrier recombination in semiconductor lasers by phase-space filling. **Applied Physics Letters**, v. 87, n. 20, p. 201112, 2015.



## PG206

# Geração de estados de Fock e o laser via interação Jaynes-Cummings não-linear

TEIZEIN, V. F.<sup>1</sup>; ROSSETTI, R. F.<sup>1</sup>; ARAÚJO, H. S.<sup>1</sup>; OLIVEIRA NETO, F.<sup>1</sup>; MORAES NETO, G. D.<sup>2</sup>; MOUSSA, M. H. Y.<sup>1</sup>

victor.teizen@usp.br

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

<sup>2</sup>Universidade Federal de Uberlândia - UFU

A preparação de estados quânticos é essencial tanto para a mecânica quântica como para a computação quântica. Para efetuar tal procedimento faz-se necessária a engenharia de interações (engenharia de hamiltonianos e engenharia de reservatórios - ou engenharia dissipativa), na qual o objetivo básico é o de controlar os estados obtidos e (ou) contornar a decoerência que estados quânticos de um sistema de interesse sofrem sob o acoplamento com outro sistema (como um reservatório, por exemplo). No caso da engenharia de hamiltonianos usualmente submete-se um subsistema de interesse à ação de um sistema auxiliar, gerando interações efetivas desejadas (com isso é possível, por exemplo, obter compressão de estados e implementar operações lógicas quânticas); no caso da engenharia dissipativa (1), é possível acoplar o sistema de interesse a um conjunto de sistemas auxiliares de forma a modificar as interações naturais que provocam a perda do caráter quântico dos estados desejados quando sob a ação de determinado reservatório, assim atingindo, por exemplo, a proteção de determinados estados quânticos. A engenharia de interações é realizada em sistemas que alcançam o regime quântico de forma plena. Em tais sistemas, usualmente, a interação com a matéria (um número pequeno de átomos) muitas vezes ocorre com um único fóton (ou com números baixos de excitação dos campos em questão). Dentre tais sistemas destacaremos dois: o sistema de eletrodinâmica quântica de cavidades e as cadeias iônicas aprisionadas. O primeiro trata-se de um sistema no qual uma cavidade de alto fator de qualidade sofre a passagem de um feixe atômico sujeito a diversos campos elétricos que possibilitam a realização da engenharia de reservatórios; o segundo trata-se de um conjunto de íons (2) que são confinados a partir de diversos campos eletromagnéticos, sendo tal confinamento (quando alcançado) descrito efetivamente em termos de excitações vibracionais coletivas, cujas trocas de excitação com os íons podem ser controladas. Nesse trabalho propomos a utilização (no contexto de cavidades) de uma técnica conhecida como seletividade (3) para geração de uma fonte de único fóton (ou seja, estados próximos do de Fock  $-1\rangle$ ) utilizando excitações pulsadas em determinado regime de parâmetros. Além disso, ainda tangendo cavidades, propomos também um protocolo para geração de um hamiltoniano efetivo do tipo Jaynes-Cummings não-linear a fim de implementar uma fonte laser não-linear. No que concerne cadeias iônicas, propomos um procedimento baseado na obtenção de hamiltonianos não-lineares que são utilizados para construir Liouvillianos que resultam na proteção de estados de Fock. Por fim, utilizamos uma cadeia de íons descrita por interação de primeiros vizinhos para realizar uma engenharia de interações na qual os estados coletivos na descrição de Jordan-Wigner são protegidos via bombesios construídos a fim de que apenas um dos estados do espectro do sistema de interesse seja excitado, suprimindo as outras excitações a fim de combater a inevitável ação do ambiente sobre o sistema de interesse.



**Palavras-chave:** Proteção de estados. Engenharia de interações. Física do laser.

**Referências:**

1 POYATOS, J. F.; CIRAC, J. I.; ZOLLER, P. Quantum reservoir engineering with laser cooled trapped ions. **Physical Review Letters**, v. 77, n. 23, p. 4728-4731, 1996.

2 JAMES, D. F. V. Quantum dynamics of cold trapped ions with application to quantum computation. **Applied Physics B**, v. 66, n. 2, p. 181-190, 1998.

3 PRADO, F. O. et al. Steady Fock states via atomic reservoir. **Europhysics Letters**, v. 107, n. 1, p. 13001-p1-13001-p6, 2014.



## PG207

# New solid forms of anti-HIV drug lamivudine (3TC): supramolecular synthons in the tunability of physicochemical properties

TENORIO, J. C.<sup>1</sup>; ELLENA, J.<sup>1</sup>

juanct@ursa.ifsc.usp.br

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

The application of the crystal engineering to the improvement of pharmacological properties of drugs from the salt/cocrystals synthesis, it is based on the design of new supramolecular *synthons* created between co-formers and drugs. The tunability of the physicochemical properties of these new solid forms, such as the stability or solubility, it is consequence of the supramolecular interactions. (1) This way, it was planned two new solid forms of lamivudine (3TC) drug: a derivative salt of picric acid, the lamivudine picrate (3TCH-pic) and a cinnamic acid cocrystal (3TC-cinna); which were measured by single crystal X-ray diffraction (SCXRD). The picrate salt, 3TCH-pic, crystallizes with an ionic pair per asymmetric unit forming a new supramolecular *synthon*, called: two donors/three acceptors (2D/3A), which is not yet reported for solid forms derived of 3TC drug. This synthon shows two donor centers (imidic and aminic nitrogen N of cytosine) and three acceptor centers (phenol groups and nitro-picric oxygens O) of N-H...O and N<sup>+</sup>-H...O hydrogen bond (HB) type, giving into the crystalline arrangement thermic stability. The cocrystal 3TC-cinna crystallizes with one 3TC and one *trans*-cinnamic acid molecule per asymmetric unit. A detailed study shows that the conformer and the drug present near pKa values, placed this new solid form into the salt-cocrystal continuum. (2) The difference between the C-O distances of the carboxylate group, justifies the cocrystal formation. The crystalline packing of 3TC-cinna cocrystal shows the formation of intercalated columns of 3TC and cinnamic acid molecules, leading to formation of highly hydrophilic and hydrophobic regions, giving evidences of a potential to pharmaceutical applications.

**Keywords:** Crystal engineering. Supramolecular synthons. Pharmaceutical properties.

### Referências:

1 WOUTERS, J.; QUÉRÉ, L. (Ed.). **Pharmaceutical salts and co-crystals**. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2012. 406 p.

2 CHILDS, S. L.; STAHLY, G. P.; PARK, A. The salt-cocrystal continuum: the influence of crystal structure on ionization state. **Molecular Pharmaceutics**, v. 4, n. 3, p. 323-328, 2007. doi: 10.1021/mp0601345.



## PG208

# Detection of long-range black hole hair through quasi-normal modes.

TEODORO, M. C.<sup>1</sup>; HARTMANN, B.<sup>1</sup>

matheuscteodoro@gmail.com

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

The present-day interest in gravitational waves, justified by the recent direct detections made by LIGO, is opening the exciting possibility to answer many questions regarding General Relativity in extreme situations. One of these questions is whether black holes are indeed described totally by their mass ( $M$ ), charge ( $Q$ ) and angular momentum ( $J$ ) or whether they can have additional long-range hair (quantities that can be measured from a far away distance). This project is concerned with this question. We aim at studying the influence of additional structure on the black hole horizon in the form of long-range hair on the quasi-normal modes of these solutions. More precisely, we will study the Schwarzschild and Kerr solutions, pierced by an infinitely long and thin cosmic string such that the space-time possesses a global deficit angle. The idea that a black hole is characterized only by  $M$ ,  $Q$  and  $J$  is known as the no-hair conjecture. Postulated during the 1960's, the conjecture does not extend to cases in which non-linear matter sources are present or where the space-time does possess curvature, i.e. is not a flat space-time far away from the source.(1) This latter case is related to what we are interested in this project. We will study black holes with a global deficit angle meaning that the angular coordinate in the  $x - y$ -plane does not go from  $0$  to  $2\pi$ , but from  $0$  to  $2\pi\beta$  with  $0 < \beta < 1$ . These type of space-times can be realized by considering a black hole pierced by an infinitely long and thin cosmic string, a 1-dimensional object orientated along the symmetry axis of the black hole. Cosmic strings are analogs of vortices in condensed matter systems and appear in many models describing early universe cosmology.(2) The tool that we are using to describe this additional structure on the black hole are quasi-normal modes (QNM). The modes are the analogous of normal modes but for dissipative systems such as black holes, which can loose energy through the emission of radiation and, in particular, gravitational waves (GW). In this sense, the QNM are believed to dominate the gravitational wave emission during the ring down phase of an excited black hole that would e.g. be the result of a merger of two ultra-compact objects. (3) The objective of this project is then to understand how the presence of the string would alter the modes and whether this alteration would be measurable. Furthermore the resulting quasi-normal modes would provide templates for analyzing GW signals. So far we accomplished an extensive bibliographic review on the topic and an introductory study on the mathematical theory of QNM. In the following, we will calculate the alterations of the standard linear perturbation theory of black hole geometries by including the cosmic string. After that we will extract the QNM related to these perturbations and compare them with the ones for the geometries without the string. With the advent of GW astronomy the proposed study will be very important when reconstructing the source of the detected GW

**Keywords:** Black holes. Quasi-normal modes. Gravitational waves.

**Referências:**



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

1 HARTMANN, B.; KLEIHAUS, B.; KUNZ, J . Axially symmetric monopoles and black holes in Einstein-Yang-Mills-Higgs theory. **Physics Review D**, v. 65, n. 2, p. 024027, 2002. doi: 10.1103/PhysRevD.65.024027.

2 HINDMARSH, M.; KIBBLE, T. Cosmic strings. **Reports on Progress in Physics**, v. 58, n. 5, p. 477, 1995.

3 KONOPLYA, R. A.; ZHIDENKO, A. Quasinormal modes of black holes: from astrophysics to string theory. **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 3, p. 793, 2011. doi: 10.1103/RevModPhys.83.793.



## PG209

# Auger recombination processes in InGaAs/InP quantum wells

TITO, M. A.<sup>1</sup>; PUSEP, Y. A.<sup>1</sup>; GOLD, A.<sup>2</sup>; TEODORO, M. D.<sup>3</sup>; MARQUES, G. E.<sup>3</sup>; LAPIERRE, R. R.<sup>4</sup>

marcoatp@ifsc.usp.br

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

<sup>2</sup>Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales - Université de Toulouse - CNRS

<sup>3</sup>Departamento de Física - UFSCar

<sup>4</sup>Department of Engineering Physics - MacMaster University

Auger recombination is one of the most important non-radiative processes which affects the efficiency of optoelectronic devices particularly at high excitation power or high injection, when a high density of carriers is generated. (1) Theoretical analysis of the direct and phonon assisted Auger recombination in InGaAs was reported. (2) However, to our knowledge no effect of the photogenerated carrier density on recombination processes has been reported. In this study, the electron transport and recombination processes of photoexcited electron-hole pairs were studied in InGaAs/InP single quantum wells. Comprehensive transport data analysis reveals asymmetric shape of the quantum well potential where the electron mobility was found to be dominated by interface-roughness scattering. The low-temperature time-resolved photoluminescence was employed to investigate recombination kinetics of photogenerated electrons. Remarkable modification of Auger recombination was observed with variation of the electron mobility. In high mobility quantum wells the increasing pump power resulted in a new and unexpected phenomenon: a considerably enhanced Auger non-radiative recombination time. We propose that the distribution of the photoexcited electrons over different conduction band valleys might account for this effect. In low mobility quantum wells, disorder-induced relaxation of the momentum conservation rule causes inter-valley transitions to be insignificant, resulting in decreasing of non-radiative recombination time with the increasing pump power. Thus, interface-roughness scattering was found responsible for both transport properties and dynamic optical response in InGaAs/InP quantum wells.

**Keywords:** Auger recombination . Quantum well. Photoluminescence.

### Referências:

1 RIDLEY, B. K. **Quantum process in semiconductors**. Oxford: Clarendon Press, 1982. 452 p.

2 WEN, H.; PINKIE, B.; BELLOTI, E. Direct and phonon-assisted indirect Auger and radiative recombination lifetime in HgCdTe, InAsSb, and InGaAs computed using Green's function formalism. **Journal of Applied Physics**, v. 118, n. 1, p. 015702-1-015702-10, 2015.





## PG210

# Femtosecond laser fabrication of high-Q whispering gallery mode polymeric microresonators

TOMAZIO, N. B.<sup>1</sup>; OTUKA, A. J. G.<sup>1</sup>; ALMEIDA, G. F. B.<sup>1</sup>; ROSELLÓ-MECHÓ, X.<sup>2</sup>; ANDRÉS, M. V.<sup>2</sup>; MENDONÇA, C. R.<sup>1</sup>

nathaliatomazio@gmail.com

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

<sup>2</sup>Department of Applied Physics and Electromagnetism - University of Valencia

Whispering gallery mode (WGM) microresonators have been attracting great interest due to the high optical power enhancement that can be achieved on them. This property makes such structures appealing for a wide range of applications, such as low threshold lasers and nonlinear optics studies. (1) Lithography based approaches have been the dominant technique for fabricating microresonators featuring planar geometries. Although these techniques are a robust and well established technology, they involve many steps of material processing that are time demanding and restrict the choices of materials to be used for fabricating microdevices, thereby hampering the widespread use of the WGM microresonators. As an alternative, we report the fabrication of such resonators in a single step of femtosecond laser writing induced by two-photon polymerization, which stands for both material and geometry flexibility. The resonators we have fabricated are 55  $\mu\text{m}$  outer diameter polymeric hollow microcylinders with good structural integrity and sidewall rms roughness found to be less than 2 nm. Their loaded Q-factor was calculated at 1550 nm as  $1.4 \times 10^5$ , which is close to the state-of-the-art performance that can be achieved for this material, limited by material losses. Furthermore, their finesse at the same wavelength is close to  $10^3$ , exceeding in more than 50 times that reported for high performance microrings fabricated using a similar material and technique. (2) These polymeric resonators can be easily functionalized with a variety of materials, such as organic dyes and metallic nanoparticles, making them an excellent platform to study laser action and nonlinear phenomena.

**Keywords:** Two-photon polymerization. Whispering gallery modes. Polymeric microresonators.

### Referências:

1 HE, L. N.; ÖZDEMİR, S. K.; YANG, L. Whispering gallery microcavity lasers. **Laser and Photonics Reviews**, v. 7, n. 1, p. 60-82, 2013. doi: 10.1002/lpor.201100032.

2 LI, L. et al. High-performance microring resonators fabricated with multiphoton absorption polymerization. **Advanced Materials**, v. 20, n. 19, p. 3668-3671, 2008. doi: 10.1002/adma.200800032.



## PG211

# Efeitos do thinning sobre o perfil de produção de múons

TOMISHIYO, G.<sup>1</sup>; SOUZA FILHO, L. V.<sup>1</sup>

tomishiyo@gmail.com

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

Devido a um fluxo pequeno, raios cósmicos de alta energia ( $E > 10^{14} eV$ ) não podem ser diretamente detectados. Para estudá-los, mede-se um fenômeno conhecido como chuva atmosférica extensa: uma grande cascada de partículas que surge a partir da interação do raio cósmico com núcleos da atmosfera terrestre. (1) Só é possível interpretar as medidas de observáveis do chuva atmosférica em termos de características do raio cósmico, entretanto, através de uma análise comparada com os resultados de softwares de simulação Monte Carlo de chuvas atmosféricas. Entretanto, o número de partículas em um chuva atmosférica escala com a energia, e portanto não é computacionalmente viável simular completamente um chuva nas energias mais altas. Para contornar esse problema, os simuladores usam uma técnica conhecida como thinning (2), que consiste em seguir apenas um pequeno conjunto das partículas totais, atribuindo a elas um peso estatístico para compensar as partículas que foram descartadas. Esse trabalho estuda os efeitos que a técnica de thinning provoca sobre o máximo do perfil de produção de múons, um observável sensível à composição da partícula primária. Verificamos que o thinning causa um aumento no máximo de produção de múons, em média. O efeito é tanto maior quanto maior for o fator de thinning e o peso máximo permitido às partículas. Um mecanismo que explica o efeito e maneiras de mitigar o fenômeno nos softwares de simulação estão sob investigação.

**Palavras-chave:** Thinning. Chuvas atmosféricas extensas. Máximo de produção de múons.

### Referências:

1 ENGEL, R.; HECK, D.; PIEROG, T. Extensive air showers and hadronic interactions at high energy. **Annual Review of Nuclear and Particle Science**, v. 61, p. 467-489, 2011. doi: 10.1146/annurev.nucl.012809.104544.

2 HILLAS, A. M. Shower simulation: lessons from MOCCA. **Nuclear Physics B**, v. 52, n. 3, p. 29-42, 1997. doi: 10.1016/S0920-5632(96)00847-X.



## PG212

# Desenvolvimento e melhoramento da enzima Taq polimerase Hot Start para aplicações biotecnológicas

TORRES, N. U.<sup>1</sup>; MALUF, F. V.<sup>2</sup>; MUNIZ, A. B.<sup>1</sup>; GUIDO, R. V. C.<sup>1</sup>

naiara.utimura@gmail.com

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

<sup>2</sup>Cellco Biotec do Brasil Ltda

A síntese de DNA *in vitro* vem sendo amplamente utilizada em laboratórios de biologia molecular, análises forenses e diagnósticos clínicos. A enzima Taq polimerase de *Thermus aquaticus* é a DNA polimerase mais utilizada para tais fins. (1) Um dos maiores problemas dessa enzima é sua atividade residual a baixas temperaturas, o que pode gerar a amplificação de DNAs inespecíficos levando a interpretações e diagnósticos errôneos. (2) Atualmente, Taq polimerases *Hot Start* estão disponíveis por empresas estrangeiras, consistindo em enzimas ligadas a anticorpos/aptâmeros que inativam a enzima a baixas temperaturas. (3) Ao utilizar um ciclo de aquecimento, ou *hot start*, os anticorpos/aptâmeros se desligam da enzima que fica livre para exercer sua atividade regularmente. (3) Visando implementar a tecnologia da Taq polimerase *Hot Start* no Brasil, o presente trabalho visa à produção de Taq polimerase *Hot Start* de alta qualidade com uma combinação de técnicas de mutagênese e produção de anticorpos e aptâmeros que inibam a atividade residual da Taq polimerase em baixas temperaturas. O trabalho proposto poderá desenvolver uma tecnologia inédita no Brasil, corroborando para a independência da importação de Taq polimerases *Hot Start* e fortalecendo a competitividade brasileira no cenário mundial.

**Palavras-chave:** Taq polimerase *Hot Start*. Anticorpos. Aptâmeros.

### Referências:

1 CHIEN, A.; EDGAR, D. B.; TRELA, J. M. Deoxyribonucleic acid polymerase from the extreme thermophile *Thermus aquaticus*. **Journal of Bacteriology**, v. 127, n. 3, p. 1550-1557, 1976. doi: PMC232952.

2 KERMEKCHIEV, M. B.; TZEKOV, A.; BARNES, W. M. Cold-sensitive mutants of Taq DNA polymerase provide a hot start for PCR. **Nucleic Acids Research**, v. 31, n. 21, p. 6139-6147, 2003. doi: 10.1093/nar/gkg813.

3 LEBEDEV, A. V. et al. Hot start PCR with heat-activatable primers: a novel approach for improved PCR performance. **Nucleic Acids Research**, v. 36, n. 20, p. 131, 2008. doi: 10.1093/nar/gkn575.



## PG213

# Nuclear magnetic resonance for oil and gas well logging applications

TREVIZAN, W.<sup>1</sup>; BONAGAMBA, T. J.<sup>2</sup>

williantrevizan@petrobras.com.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP / Petrobrás

<sup>2</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) techniques are widely used by petroleum industry for *in situ* rock formation characterization. (1) Fluid saturating rocks' spins (usually Hydrogen nuclei) are polarized with the use of permanent magnets, with field intensity of about 500 gauss, causing a net magnetization to appear inside the reservoir's sensitive volume. Resultant magnetization can be manipulated by sequences of radiofrequency pulses, and relaxation to equilibrium is observed. Longitudinal and transverse relaxation times (T1 and T2, respectively) correlate with the environment properties, such as pore sizes, pore walls mineralogy and fluid diffusion coefficient. One of the most important properties is the pore size distribution, which is proportional by a constant called surface relaxivity, to the relaxation times distribution. Therefore, NMR provides an *in situ* estimate of pore sizes, which can be theoretically correlated to rock permeability, an important petrophysical parameter. It has been found that a better estimate of surface relaxivity, hence a more accurate measurement of pore sizes, can increase considerably permeability calculations, however, downhole estimations of such parameter are not available. In this work, we explore the restrictions in diffusion coefficients as a probe of surface relaxivity, expanding the applications of laboratory measurements to direct downhole estimations of this parameter. We show that the method can be applied to real well logging data.

**Keywords:** Nuclear magnetic resonance. Well logging. Restricted diffusion.

### Referências:

1 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D.J.; LATORRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance:** petrophysical and logging applications. Amsterdam: Pergamon, 2002. 312 p.



## PG214

# On symmetry breaking and the Unruh effect

ULIANA, C.<sup>1</sup>; VANZELLA, D. A. T.<sup>1</sup>

uliana@ifsc.usp.br

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

It has been forty years since Unruh elucidated the intrinsic relation between the Minkowski vacuum and thermal behavior from the reference frame of uniformly accelerated observers. (1) Nevertheless questions still remain regarding the nature of certain phenomena, one of them being spontaneous symmetry breaking. In inertial thermal field theory broken symmetries are restored by a finite temperature, and therefore is natural to ask if the Unruh temperature can also perform this role. Despite early work arguing on the negative (2) there is a string of recent papers that purport that the Unruh effect indeed can restore a broken symmetry just as any thermal bath, e.g. (3) By focusing on the algebra of symmetries we will present a new argument showing how the Unruh effect is manifestly incapable of restoring broken symmetries in the usual field theoretical definition, as well as discussing the source of the controversy. We will also discuss the related, but distinct, question of a accelerated probe with different phases coupled to the Unruh bath. In this case we show that, contrary to the field situation with broken symmetries, we do expect to see a phase transition induced on the probe due to the Unruh effect.

**Keywords:** Unruh effect. Finite-temperature field theory. Spontaneous symmetry breaking.

### Referências:

- 1 UNRUH, W. G.; WEISS, N. Acceleration radiation in interacting field theories. **Physical Review D**, v. 29, n. 8, p. 1656-1662, 1984.
- 2 HILL, C. T. Can the hawking effect thaw a broken symmetry?. **Physics Letters B**, v. 155, n. 5-6, p. 343-346, 1985.
- 3 CASTORINA, P.; FINNOCHIARO, M. Symmetry restoration by acceleration. **Journal of Modern Physics**, v. 3, n. 11, p. 1703-1708, 2012.

## PG215

# Dinâmica dos éxcitons e transporte de carga em heteroestruturas orgânicas contendo modulação energética visando a aplicação em OLEDs

VALENTE, G. T.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

gtv@ifsc.usp.br

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

Diodos orgânicos emissores de luz (OLEDs) contendo heteroestruturas orgânicas com modulação energética (barreira ou poço de potencial) apresentam-se como uma interessante alternativa para promover o confinamento dos portadores de carga, favorecendo a geração de éxcitons e conseqüentemente a produção de luz. (1) Compreender como é a dinâmica dos éxcitons (par elétron-buraco) bem como o transporte das cargas (elétrons e buracos) em tais heteroestruturas é um etapa fundamental para otimizar a performance dos OLEDs. Nesse estudo, produziu-se heteroestruturas orgânicas do tipo poço de potencial utilizando filmes ultrafinos com espessuras menores que o raio de migração dos éxcitons (10 nm) utilizando a técnica de *spin-coating*. Utilizou-se moléculas de clorofila *a* (chl<sub>a</sub>) e de polifluorenos (PFO) como material de baixo e alto *gap* de energia, respectivamente. Microscopia Confocal de Varredura a Laser (LSCM) e de Imagem de Tempo de Vida (FLIM) foram utilizadas para avaliar a homogeneidade da heteroestrutura bem como investigar os processos fotofísicos nesse sistema. Para investigar o transporte e a dinâmica das cargas o método de simulação de Monte Carlo baseado no modelo de Desordem Gaussiana (GDM) em duas dimensões foi implementado e validado. (2) As imagens obtidas com a técnica LSCM revela que os filmes ultrafinos que constituem a heteroestrutura PFO/chl<sub>a</sub> são homogêneos e não possuem falhas de recobrimento dentro da resolução óptico de 200 nm no plano confocal. Isso garante que os éxcitons fotogerados no filme ultrafino de PFO, durante o tempo de vida (1 ns), migrem pelos segmentos conjugados poliméricos e sejam transferidos eficientemente para a camada de chl<sub>a</sub>. Como consequência, observou-se uma redução de 18 vezes na luminescência do PFO quando comparado com um filme de PFO isolado. Esse processo de transferência de energia não radiativo afeta a dinâmica dos éxcitons no PFO reduzindo o tempo de decaimento em aproximadamente oito vezes. Além disso, os resultados da simulação do transporte de carga via método de Monte Carlo revelam que as cargas ficam confinadas no poço de potencial (do tipo armadilha profunda) mesmo para campos elétricos da ordem 1 MV/cm. Obteve-se uma taxa de preenchimento de buracos no poço de 109 buracos/s para a situação de um poço de potencial situado no meio do dispositivo. Neste caso, devido a maior mobilidade eletrônica dos buracos em relação aos elétrons, todos os sítios na camada do poço de potencial estarão preenchidos por buracos antes que os elétrons encontrem essa camada. Isso proporciona uma eficiente formação de éxciton nesse sistema. Espera-se que esses resultados possam contribuir com o planejamento experimental de OLEDs contendo heterosestruturas com modulações energéticas.

**Palavras-chave:** Fotofísica. Dinâmica de cargas. OLEDs.

**Referências:**



1 HECK, V. C. **Transporte de carga e eletroluminescência em diodos orgânicos emissores de luz contendo poços de potencial.** 2015. 138p. Dissertação (Mestrado em Ciência e Engenharia de Materiais) - Escola de Engenharia de São Carlos, Instituto de Química de São Carlos, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2015.

2 BÄSSLER, H. Charge transport in disordered organic photoconductors: a Monte Carlo simulation study. **Physica Status Solidi B**, v. 175, n. 1, p. 15-56, 1993. doi: 10.1002/pssb.2221750102.



## PG216

# Adiabatic quantum computing using superconducting qubits

VARGAS, J.<sup>1</sup>; BRITO, F.<sup>1</sup>

juanvagra@ursa.ifsc.usp.br

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

Adiabatic quantum computing (AQC) has its cornerstone on the adiabatic theorem (1), whose efficiency is related to the ratio of the temporal variation of the Hamiltonian that describes the system and the minimum gap between the ground and excited state. Usually, this gap tends to decrease when one increases the resources (quantum bit: qubit) of a quantum processor, requiring slow Hamiltonian variations, in order to ensure an adiabatic dynamics. Among the candidates for its physical implementation, qubits based on superconducting circuits have a great potential, showing exquisite control and promising scalability. (2) However, when these qubits are implemented, they have an intrinsic source of noise due to manufacturing errors, which cannot be neglected. (3) Because of that, we study the fidelity of computation as a function of standard deviation of the qubit physical parameters, finding that the implementation is very robust when is considered an ensemble average of the results. Additionally, a dissipative analysis was performed using an effective non-Hermitian Hamiltonian for describing a non-unitary dynamics of the system of interest, and showing how the bath temperature plays a beneficial role in the adiabatic computation.

**Keywords:** Adiabatic quantum computing. Superconducting qubits. Effective Hamiltonian.

### Referências:

1 FARHI, E.et al.. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem. **Science**, v. 292, n. 5516, p. 472, 2001. doi: 10.1126/science.1057726

2 CLARKE, J.; WILHELM, F. K.. Superconducting quantum bits. **Nature** , v. 453, p. 1031, 2008. doi: 10.1038/nature07128.

3 HARRIS, R.et al.. Synchronization of multiple coupled rf-SQUID flux qubits. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 123022, p. 10, 2009. doi: 10.1088/1367-2630/11/12/123022.





## PG217

# Análise dos quantificadores da desordem em superfluidos atômicos de $^{87}\text{Rb}$ altamente perturbados

VIVANCO, F. J.<sup>1</sup>; TAVARES, P. E. S.<sup>1</sup>; FRITSCH, A. R.<sup>1</sup>; TELLES, G. D.<sup>1</sup>; HENN, E. A. L.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

franklinze@gmail.com

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

Condensados de Bose-Einstein (BEC) são o ponto de partida para diversos experimentos nos quais pode-se testar os limites da validade das teorias quânticas. Os condensados quando produzidos em uma armadilha harmônica são também superfluidos e podem exibir a presença de vórtices quantizados. Estes vórtices podem ser gerados por impressão de fase topológica, perturbação externa, introduzindo momento angular no condensado diretamente, assim como outros métodos. (1) O entrelaçamento destes vórtices é chamado de turbulência quântica superfluida. Por outro lado condensados podem também apresentar outro tipo de turbulência, denominada de turbulência fraca (ou wave turbulence) a qual se apresenta como flutuações randômicas na densidade atômica do condensado. Quando geradas experimentalmente estes dois tipos de turbulência podem estar presentes ao mesmo tempo, exibindo desordem, pelo que é desejado poder reconhecer cada um destes regimes. Assim, introduzimos um quantificador para a desordem da densidade atômica, a entropia diferencial, a qual é uma versão continua da entropia de Shannon (2) e mede o grau de desordem global. Para obter informação sobre as escalas de desordem presentes na nuvem atômica usamos a função de correlação de segunda ordem, função que mede a correlação entre dois átomos na amostra separadas por uma distância dada. O comprimento de correlação vai nos dar informação sobre o tamanho das flutuações no sistema, e vai ser o nosso quantificador espacial da desordem. Experimentalmente produzimos condensados de Bose-Einstein de  $^{87}\text{Rb}$  no estado hiperfino  $m_F = 2$  em uma armadilha harmônica, introduzimos uma perturbação oscilatória e produzimos amostras condensadas altamente perturbadas. Estas amostras exibem vórtices (3) e flutuações na densidade, indicativos de turbulência no sistema. A análise é feita nas imagens de absorção em tempo de voo, para diferentes amplitudes de perturbação. A análise dos quantificadores de desordem é feita da imagem de absorção e extraímos a entropia diferencial como função da perturbação e os comprimentos de correlação. A partir daqui a identificação dos regimes de turbulência esta sendo levada a cabo.

**Palavras-chave:** Condensados de Bose-Einstein. Turbulência quântica. Superfluidos.

### Referências:

1 WHITE, A. C.; ANDERSON, B. P.; BAGNATO, V. S. Vortices and turbulence in trapped atomic condensates. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 111, n. 1, p. 4719, 2014. doi: 10.1073/pnas.1312737110.

2 GARBACZEWSKI, P. Differential entropy and dynamics of uncertainty. **Journal of Statistical Physics**, v. 123, n. 2, p. 315, 2006. doi: 10.1007/s10955-006-9058-2.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

3 HENN, E. A. L. et al. 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.



## PG218

# Substrate interaction at single molecule level to organic semiconductors

ZAGO, L. A.<sup>1</sup>; GUIMARÃES, F. E. G.<sup>1</sup>

leandro.zago@usp.br

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

The future of electronics lies in the advancement of technology with organic materials, these in turn have advantages such as flexibility, ease of processing and degradation in nature. It is therefore necessary that these materials be well characterized. In this study, we investigated the photophysical characteristics of semi conjugated polymer poly (9,9dioctilfluoreno) (PFO) produced by spin-coating technique. The PFO exhibits a well-defined absorbance with the maximum at 390 nm (the blue band) that is related to the  $\pi$ -conjugated band. Using spectroscopic techniques, such as the confocal laser scanning system and a cryogenic coupled to a spectrometer, it was investigated films that have thicknesses smaller than the radius of the exciton dissociation (10 nm). (1) The conformation of the deposited molecules are highly altered by interaction with the substrate and temperature (2), creating planar phases,  $\beta$ -phase. For this different quartz substrates was prepared by modifying the hydrophilicity by an oxygen plasma treatment and along with high dilutions was possible to investigate the transition between the film regime and isolated molecule. The dependence of this system with temperature was also analyzed, through cooling and heating cycles.

**Keywords:** Spin-coating. Poli(9,9 dioctilfluoreno) (PFO). Single-molecule.

### Referências:

1 ARIU, M. et al. Exciton migration in  $\beta$ -phase poly.9,9-dioctylfluorene. **Physical Review B**, v. 67, n. 19, p. 195333-1-195333-11, 2003. doi: 10.1103/PhysRevB.67.195333.

2 ANNI, M. et al. The role of excitons' quasiequilibrium in the temperature dependence of the poly(9,9-dioctylfluorene)  $\beta$  phase photoluminescence. **Journal of Chemical Physics**, v. 124, n. 13, p. 134707-1-134707-7, 2006. doi: 10.1063/1.2179795.

## PG219

# Descontaminação de biofilmes com terapia fotodinâmica em tubo endotraqueal

ZANGIROLAMI, A. C.<sup>1</sup>; BLANCO, K. C.<sup>1</sup>; BAGNATO, V. S.<sup>1</sup>

amanda.zangirolami@usp.br

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

O trabalho recorre a Terapia Fotodinâmica (TFD) para descontaminação de tubos endotraqueais contaminados por biofilmes em pacientes acamados. A contaminação bacteriana em pacientes acamados que fazem uso de tubos endotraqueais pode ocorrer por vias como: água e ar; entre paciente e profissionais de saúde ou por aparelhos como endoscópios. (1) Os antibióticos e outras substâncias químicas já não estão conseguindo recuperar pacientes devido à resistência microbiana. (2-3) A TFD é uma alternativa de descontaminação e esterilização, para a qual não há registros de resistência bacteriana. A ideia é combinar a ação da luz a uma molécula fotossensível, o fotossensibilizador (FS). A luz fornece energia para a molécula do FS e duas reações diferentes ocorrem. Radicais livres e oxigênio singleto são produzidos e irão atuar na morte celular. Este estudo pretende descontaminar tubos endotraqueais in vitro objetivando futuramente ser aplicado em pacientes em leitos hospitalares. A curcumina, derivada do açafrão, é o FS escolhido para a realização deste estudo. Testes com os FS Photodithazine (PDZ), derivado da alga *Spirulina máxima*, foram realizados para comparação da eficiência da TFD. Para a absorção destas duas moléculas está sendo utilizado Laser e LED em 450 nm (curcumina) e 635 nm (PDZ). O tubo endotraqueal é revestido com formulações contendo essa molécula fotossensibilizadora e acoplada ao mesmo fibras ópticas - que realizam a inativação fotodinâmica de micro-organismos em pacientes intubados. O objetivo do estudo é melhorar a qualidade de vida do paciente, evitando que biofilme se forme e cause infecções O crescimento de biofilme é feito com *Escherichia coli* e *Staphylococcus aureus* em, tubos endotraqueais. Tempos diferentes de formação de biofilme (24h, 72h, 4 e 7 dias), bactérias gram positiva e gram negativa foram estudadas. As concentrações da curcumina testadas foram de 0,25 a 1,5 mg/mL, e as doses de luz variam de 15 a 50 J/cm<sup>2</sup>. Todos os testes foram feitos na biotable (fonte de Leds), com uma irradiância de 35 mw/cm<sup>2</sup>. Testes foram desenvolvidos também com a ajuda do banho ultrassônico. Os experimentos e as referências indicam que para inativar biofilmes é necessárias concentrações e doses de luz maiores do que as utilizadas para bactérias planctônicas, devido a estrutura do biofilme ser complexa, chamada matriz extracelular (EPS). O trabalho esta encaminhando para otimização dos parâmetros e quando alcançada será testadas diferentes tipos de formulações do FS. Este estudo pode gerar uma melhor qualidade de vida de pacientes que fazem uso destes tubos , sem que seja necessário retirá-los do paciente em casos de formação de biofilme. Sendo assim, podendo auxiliar os profissionais da saúde a cuidar dos pacientes de uma maneira menos invasiva.

**Palavras-chave:** Terapia fotodinâmica. Biofilme. Fotossensibilizador.

### Referências:

1 LINDSAY, D.; HOLY, A. Bacterial biofilms within the clinical setting: what healthcare professionals



should know. **Journal of Hospital Infection**, v. 64, n. 4, p. 313-325, 2006. doi: 10.1016/j.jhin.2006.06.028.

2 ZANIN, I. C. J. et al. Susceptibility of *Streptococcus mutans* biofilms to photodynamic therapy: an in vitro study. **Journal of Antimicrobial Chemotherapy**, v. 56, n. 2, p. 324-330, 2005. doi: 10.1093/jac/dki232.

3 WOOD, S. et al. An in vitro study of use of photodynamic therapy for the treatment of natural oral plaque biofilms formed in vivo. **Journal of Photochemistry and Photobiology B**, v. 50, n. 1, p. 1-7, 1999. doi: 10.1016/S1011-1344(99)00056-1.



## PG220

# Density Functional Theory for strong correlated systems

ZAWADZKI, K.<sup>1</sup>; OLIVEIRA, L. N.<sup>1</sup>; D'AMICO, I.<sup>2</sup>

krissia.zawadzki@usp.br

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

<sup>2</sup>Department of Physics - University of York

Density Functional Theory (DFT) has become one of the most used approaches to study quantum many-body problems. The increasing popularity of DFT can be explained by the new paradigm it has introduced to quantum mechanics, replacing the wave function by the functional of the density and mapping an interacting system on to a non-interacting one subject to an effective potential and described by a single-particle Hamiltonian - two manageable objects. (1) Currently, through density functional computations it is possible to investigate the electronic structure of solid state systems and accurately calculate their properties. While the success of DFT is unquestionable for weakly interacting particles, the strongly correlated regime defies theorists in searching for good approximations for density functionals. Inspired by recent works combining numerical calculations based on the Renormalization-Group techniques - namely, the Numerical (NRG) and Density-Matrix (DMRG) Renormalization-Groups - and Density Functional Theory we propose to develop a DFT framework to construct a numerical approximation for functionals of the density. (2) To this end, we will consider a modified version of the 1-D Hubbard model in which we introduce a special site having a different coupling  $t$  to its first neighbors and a high repulsion cost  $U$  for double occupation, so that the corresponding Hamiltonian can be mapped on the problem of a quantum dot. (3) Our proposal is to embed the density functional on the renormalization group flow and develop the RG iterative cycle through an optimized implementation. We will compare the results for the exact exchange-correlation functional with approximate forms based on the local density approximation (LDA) and the numerical calculations (DM-NRG). We believe that the proposed study could open a new avenue in the treatment of many-body quantum problems in which strong couplings play an essential role.

**Keywords:** Density Functional Theory. Strong correlated systems. Numerical renormalization-group.

### Referências:

1 CAPELLE, K.; CAMPO JUNIOR, V. L. Density functionals and model Hamiltonians: pillars of many-particle physics. **Physics Reports**, v. 528, n. 3, p. 91-159, 2013. doi: 10.1016/j.physrep.2013.03.002.

2 WAGNER, L. O. et al. Kohn-Sham calculations with the exact functional. **Physical Review B**, v. 90, n. 4, p. 045109-1-045109-15, 2014. doi: 10.1103/PhysRevB.90.045109.

3 LIMA, N. A. et al. Density functionals not based on the electron gas: local-density approximation



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

for a Luttinger liquid. **Physical Review Letters**, v. 90, n. 14, p. 146402-1-146402-4, 2003. doi: 10.1103/PhysRevLett.90.146402.



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP





## Índice de Autores

A	
ADESSO, G. ....	342
AGUIAR, C. ....	356
AKIMUSHKIN, C. ....	63
ALESSI, A. M. ....	233
ALMEIDA FILHO, H. A. ....	50, 64
ALMEIDA, G. F. B. ....	65, 310, 369
ALMEIDA, J. M. P. ....	65, 271, 310
ALMEIDA, L. O. de ....	182
ALMEIDA, L. R. ....	66
ALMEIDA, N. S. ....	188
ALTAIR, T. ....	67
ALVES, A. B. ....	182
AMANCIO, D. ....	63
AMARANTE, A. M. ....	68
AMORIM, D. R. B. ....	70
ANDRÉS, M. V. ....	369
ANDRADE, G. B. ....	71
ANDRADE, M. B. ....	45, 138, 215, 287
ANDRADE, R. A. P. ....	102
ANDREETA, M. B. ....	73
ANDRICOPULO, A. D. ....	218, 228, 311, 352, 356
ANJOS, C. F. ....	31
APRILE, N. P. ....	75
ARAÚJO, A. P. U. ....	33, 123, 252, 308
ARAÚJO, E. A. ....	76
ARAÚJO, F. L. ....	78
ARAÚJO, H. S. ....	363
ARAÚJO-FERREIRA, A. G. ....	217
ARAÚJO, A. P. U. ....	236
ARAÚJO, A. P. U. ....	164, 223, 248
ARAÚJO, G. D. ....	79
ARAÚJO-FERREIRA, A. G. ....	246
ARGENTIN, M. N. ....	81
ARTHUZO, G. ....	230
ASSAF, E. M. ....	126
ATENCIO, D. ....	215
AURICHIO, V. H. ....	83
AZEVEDO, E. R. ....	139, 342
AZEVEDO, E. C. de ....	84
B	
BACHELARD, R. ....	232
BACHELARD, R. P. M. ....	150



BAGNATO, G. G. ....	86, 299
BAGNATO, V. S. 48, 117, 121, 122, 152, 166, 175, 184, 204, 230, 243, 268, 284, 290, 295, 297, 298, 334, 340, 347, 360, 377, 380	
BALOGH, D. T. ....	310
BARBANO, E. C. ....	88, 137
BARENGHI, C. F. ....	122
BARRA, A. L. C. ....	33
BARRETO, D. L. ....	90
BARROS, K. L. P. de ....	91
BASSO, L. G. M. ....	158, 328
BASTOS, C. M. O. ....	92
BATISTA, R. F. M. ....	93
BATISTA, R. J. M. B. ....	149
BELLINI, N. K. ....	94
BENATTI, A. ....	96
BERNARDI, M. I. B. ....	126
BESSE, R. ....	97
BIANCHI, P. ....	58
BLANCO, K. C. ....	380
BOGNI, S. C. ....	261
BOITO, D. ....	31
BOITO, D. R. ....	263
BONAGAMBA, T. J. ....	73, 217, 246, 372
BORALLI, C. M. S. ....	98
BORGES, M. C. T. ....	35
BORTOLETTO-SANTOS, R. C. ....	41
BOSSOLAN, N. R. S. ....	81, 133
BOTELHO JUNIOR, M. V. ....	37
BOUDAUD, M. ....	39
BRAZACA, L. C. ....	100
BRITO, F. ....	101, 220, 376
BROGNARA, G. ....	38
BRUCE, N. C. ....	233
BRUNELLI, R. ....	102
BRUNO, O. M. ....	50, 64, 192, 322
BUENO, C. ....	297
BUENO, E. F. ....	39
BUENO, R. V. ....	104
<b>C</b>	
CÂMARA, A. S. ....	118
CAETANO, J. B. ....	288
CAFACE, R. A. ....	106
CAIRES, F. R. ....	107
CAMARGO, I. ....	144
CAMARGO, I. L. B. C. ....	261
CAMARGO, S. ....	109



CAMPANA-FILHO, S. P. ....	273
CAMPOS, C. P. ....	110
CAMPOS, T. ....	112
CANCINO-BERNARDI, J. ....	214, 235, 293, 317
CANDIDO, D. R. ....	113
CANELLA, G. A. ....	40
CARACANHAS, M. A. ....	121
CARDOSO, A. R. ....	338
CAROFF, S. ....	39
CARVALHO JUNIOR, P. S. ....	49
CARVALHO, L. F. ....	114
CARVALHO, M. M. ....	116
CASSAGO, A. ....	162, 236
CASTILHO, P. C. M. ....	48, 117
CASTRO NETO, J. C. ....	181, 230, 267
CASTRO, P. J. ....	294
CERINI, M. F. ....	120
CHAVEZ, R. ....	356
CHAVIGURI, R. H. ....	121
CHERUBIM, C. F. ....	101
CIDRIM, A. ....	122
CIOL, H. ....	123
COCCA, L. H. Z. ....	124, 180
COELHO, F. B. ....	286
COLETTA, V. C. ....	126
COLNAGO, N. A. ....	41
COLUCCI, R. ....	128
CONSALTER, D. ....	130
CORREA, D. ....	361
CORREIA, A. R. ....	131
CORRER, W. R. ....	294
COSTA FILHO, J. I. da ....	132
COSTA, G. C. ....	133
COSTA, L. F. ....	161
COSTA, Y. A. ....	135
COURA, J. A. G. ....	137
COURTEILLE, P. W. ....	60
CRUZ, C. G. C. ....	138
CRUZ, F. ....	356
CUCCHIERI, A. ....	37, 83, 114
CUNHA, G. P. ....	139
D	
D'AMICO, I. ....	382
DA SILVA, J. L. F. ....	97, 173
DA SILVA, P. C. V. ....	140
DALPIAN, G. M. ....	316



DE BONI, L. ....	57, 65, 124, 149, 180
DE CASTRO, L. A. ....	142
DE GROOTE, M. C. R. ....	144
DEFFUNE, E. ....	243
DEMARCO, R. ....	156
DEVAI MORAES, R. R. ....	145
DIAS, L. C. ....	356
DIAS, P. G. S. ....	43, 48
DINIZ, L. F. ....	147
DIPOLD, J. ....	149
DIPOLDI, J. ....	225
DUONG, D. T. ....	139
<b>E</b>	
EGUES, J. C. ....	113
ELDERING, J. ....	313
ELLENA, J. ....	45, 147, 215, 287, 365
ELLENA, J. A. ....	49
ESCOBAR, A. ....	295
ESPIRITO SANTO, T. S. ....	150
<b>F</b>	
FABBRI, R. ....	151
FABIAN, J. ....	112
FALVO, M. ....	286
FARIA JUNIOR, P. E. ....	112
FARIA, C. M. G. ....	152
FARIA, G. C. ....	128, 139
FARIA, H. A. M. ....	154
FARIA, R. M. ....	70, 78
FARIA, W. J. G. J. ....	155
FARIAS, K. M. ....	48, 117
FATIBELLO FILHO, O. ....	190
FELIZATTI, A. P. ....	156
FERNANDES, A. F. ....	158, 328
FERREIRA, C. T. T. ....	44
FERREIRA, F. ....	159
FERREIRA, R. S. ....	356
FERREIRA, S. J. V. ....	161
FLOREZ ARIZA, A. ....	162
FONSECA, R. D. ....	149, 163, 310
FONTANARI, J. F. ....	169
FONTES, M. G. ....	164
FORTULAN, C. A. ....	217
FORTUNATO, T. C. ....	166
FRANCA, E. F. ....	68
FRANCISCO, L. H. ....	167
FRANCO, C. ....	169



FRANCO, M. A. M. ....	171
FREIRE, R. L. H. ....	173
FREITAS, L. C. G. ....	68
FRITSCH, A. R. ....	175, 377
FUKAI, T. ....	116

**G**

GALANTE, D. ....	67, 120, 280
GALANTUCCI, L. ....	122
GARCIA, G. S. ....	45, 138
GARCIA, M. L. ....	176
GARRATT, R. ....	206
GARRATT, R. C. ....	236
GETELINA, J. C. ....	178
GLASER, S. ....	342
GMITRA, M. ....	112
GODOY, A. ....	256
GOLD, A. ....	368
GOMES JUNIOR, F. G. ....	221
GONÇALVES, D. ....	190
GONÇALVES, L. F. ....	179
GONÇALVES, M. R. ....	182
GONÇALVES, R. V. ....	126
GOTARDO, F. ....	124, 180
GOVONE, A. B. ....	181
GREJO, M. P. ....	47
GUARIENTO, R. T. ....	182
GUERRA, D. G. ....	162
GUESSI, L. H. ....	183
GUIDO, R. V. C. ....	104, 176, 194, 211, 266, 354, 371
GUIMARÃES, F. E. G. ....	106, 233, 243, 259, 273, 283, 298, 308, 374, 379
GUTIERREZ, E. M. ....	48, 184
GUTIERREZ, R. F. ....	33

**H**

HAI DUKE, R. L. A. ....	40
HARTMANN, B. ....	75, 366
HEEL, M. V. ....	328
HELLEN, H. ....	308
HENN, E. A. L. ....	43, 175, 377
HENRIQUE, F. R. ....	185, 310
HERNANDES, A. C. ....	167, 294
HIGASI, P. ....	186
HIROTA, L. C. B. ....	188
HORJALES REBOREDO, E. ....	118
HORJALES, E. ....	144
HOYOS, J. A. ....	178



<b>I</b>	
IBÁNEZ, G. ....	190
IERICH, J. C. M. ....	68
INADA, N. ....	110
INADA, N. M. ....	152, 204, 334, 340
<b>J</b>	
JO, J. ....	301
JOCHELAVICIUS, K. ....	191
JUSTO, M. J. M. ....	192
<b>K</b>	
KADOWAKI, M. A. S. ....	256
KATEKAWA, E. ....	194
KHATTAK, S. ....	284
KIEJNA, A. ....	173
KROGH, R. ....	356
KRUGER, A. L. ....	195
KUBOTA, T. M. K. ....	197
KURACHI, C. ....	38, 110, 284, 295, 301, 360
<b>L</b>	
LANG, R. G. ....	199
LAPIERRE, R. R. ....	368
LAPORTE, R. S. ....	201
LEAO, R. M. ....	58
LEITE, A. E. T. ....	202
LEITE, F. L. ....	68
LEITE, I. S. ....	204
LEONARDO, D. A. ....	206
LEONI, R. F. ....	275
LIMA FILHO, J. B. ....	208
LIMA, A. L. de ....	209
LIMA, G. M. A. ....	211
LIMA, M. Z. T. ....	55
LIMA, R. B. B. ....	213
LINGELEM, A, B, D. ....	252
LINS, P. ....	214
LOPES, G. A. C. ....	215
LOPES, J, L. ....	252
LORDELLO, V. ....	216
LORENZON, E. N. ....	191
LUCAS-OLIVEIRA, E. ....	217, 246
LYLES, Z. ....	204
<b>M</b>	
MACEDO, J. N. A. ....	123, 223
MAGALHÃES, A. B. ....	197



MAGALHÃES, D. V. ....	297
MAGALHÃES, L. G. ....	218, 228, 311
MAGALHAES, A. B. ....	288
MAIA, L. P. ....	79, 116
MALAVAZI, A. H. A. ....	220
MALUF, F. V. ....	371
MARASSI, A. ....	130
MARASSI, A. G. ....	221
MARCASSA, L. G. ....	140, 179, 277
MARCOS, F. C. F. ....	126
MAREGA JUNIOR, E. ....	244, 350
MARQUES, G. E. ....	368
MARTINELLI, T. ....	222
MARTINS, C. S. ....	223
MARTINS, M. ....	286
MARTINS, R. J. ....	65, 225
MARTINS, V. B. ....	226
MASCARENHAS, S. ....	102
MASCARENHAS, Y. P. ....	35, 41, 340
MASCHIO, E. H. M. ....	227
MASTELARO, V. R. ....	62, 91, 126
MATIAS, P. ....	330
MATOS, K. S. ....	228
MATOS, L. ....	230, 267
MATTOS, V. S. ....	230
MAXIMO, C. E. ....	232
MAZO, P. L. ....	48
MCQUEEN-MASON, S. ....	233
MEDINA, A. C. Q. D. ....	49
MELLO, B. L. ....	233
MELO, C. C. ....	235
MENDES, T. ....	114, 326
MENDES, T. C. R. ....	239
MENDONÇA, C. R. ....	65, 149, 163, 185, 225, 310, 369
MENDONÇA, D. C. ....	236
MENEGHELLO, R. ....	338
MENEZES, L. P. ....	238
MENEZES, P. F. C. ....	290
MERA, A. E. M. ....	55
MERCADO-GUTIERREZ, E. D. ....	117
MERENDA, J. V. B. S. ....	50
MEYER, M. ....	288
MICHALOWICZ, A. ....	126
MIGLORIA, A. ....	239
MIGUEZ, M. L. ....	137, 240
MIKUNI, V. M. ....	242
MILORI, D. M. B. P. ....	195, 197, 288, 320



MION, W. ....	243
MIRANDA, M. M. P. ....	244
MIRANDA, P. B. ....	208, 316
MISOGUTI, L. ....	88, 137, 240, 358
MODA, T. L. ....	228
MONTALVÃO, R. W. ....	107, 332, 345
MONTRAZI, E. T. ....	246
MORAES NETO, G. D. ....	363
MORAES, A. S. ....	68
MORAIS, S. T. B. ....	248
MORAZOTTI, N. A. C. ....	250
MOREIRA, H. H. T. ....	252
MORIYAMA, L. T. ....	166
MORRETI, T. A. ....	243
MOUSSA, M. H. Y. ....	227, 265, 304, 344, 348, 363
MULINARI, E. J. ....	253
MUNIZ, A. B. ....	371
MUNIZ, H. S. ....	254
MUNIZ, J. R. C. ....	47, 55, 66, 109, 253
MUNIZ, S. R. ....	188, 271
<b>N</b>	
NAKADA, P. J. T. ....	51
NAKAMURA, A. M. ....	256
NAKASHIMA, D. K. ....	53
NAPOLITANO, R. J. ....	142, 250
NARDI, A. B. ....	295
NARDI, L. M. C. ....	257
NASCIMENTO, A. S. ....	84, 202, 254, 278
NAVARRO, M. V. A. S. ....	71, 302, 338
NAVASCUES, F. F. ....	41
NEGREIROS, F. R. ....	316
NICOLODELLI, G. ....	195
NOBRE, T. M. ....	191
NOGUEIRA, F. G. E. ....	126
NOGUEIRA, M. S. ....	259
NUNES, L. A. O. ....	155
<b>O</b>	
OKADO, J. B. ....	261
OLIANI, F. H. ....	263
OLIVA, G. ....	356
OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ....	63, 68, 151, 190, 191, 351
OLIVEIRA NETO, F. ....	265, 363
OLIVEIRA, A. A. ....	266
OLIVEIRA, A. O. ....	230, 267
OLIVEIRA, B. P. ....	268
OLIVEIRA, E. L. ....	73





OLIVEIRA, G. S. ....	68
OLIVEIRA, I. M. ....	269
OLIVEIRA, L. N. ....	183, 306, 382
OLIVEIRA, M. L. B. ....	83
OLIVEIRA, M. T. ....	352
ONCEBAY SEGURA, C. ....	271
ONO, B. A. ....	273
OTUKA, A. J. G. ....	369
<b>P</b>	
PAIVA, F. F. ....	62, 135, 188, 238, 269, 275, 336
PAIVA, M. L. M. F. ....	188
PALOMBO, P. ....	58
PAOLILLO, F. R. ....	230
PAPOTI, D. ....	130
PASCHOAL, A. M. ....	275
PASSAGEM, H. F. ....	140, 277
PAULA, K. ....	278
PAULI, I. ....	228
PEÑAFIEL, E. E. P. ....	48
PEDROZA, L. S. ....	316
PEDROZO-PEÑAFIEL, E. ....	117
PEREIRA, R. G. ....	323, 350
PEREIRA, T. ....	313
PERES, L. M. C. ....	280
PERON, T. K. D'M. ....	281
PINCUS, S. ....	308
PINTO JUNIOR, F. F. ....	283
PINTO, A. P. A. ....	123
PINTO, D. de O. S. ....	132
PINTO, R. D. ....	182
PIRES, L. ....	284
PIZANI, P. S. ....	294
PIZETTA, D. C. ....	62, 286
PLANETA, C. da S. ....	58
POLIKARPOV, I. ....	51, 76, 186, 202, 233, 256
POLLI, S. ....	73
PORTUGAL, R. ....	162
PORTUGAL, R. V. ....	236, 328
PRATAVIEIRA, S. ....	298, 301
PUSEP, Y. A. ....	362, 368
<b>Q</b>	
QUEIROZ, A. A. A. E. ....	287
<b>R</b>	
RANULFI, A. C. ....	288
REPOILA, F. ....	144



REQUENA, M. B. ....	290
REZENDE, C. ....	356
RIAÑO-PACHÓN, D. M. ....	233
RIBEIRO, C. ....	292
RIBOVSKI, L. ....	293
RIVAS, N. ....	120
ROCHA, R. W. ....	295
ROCHA, T. S. ....	55
RODRÍGUEZ, R. C. ....	140
RODRIGUES, E. L. L. ....	135
RODRIGUES, F. A. ....	73, 281
RODRIGUES, J. E. F. S. ....	167, 294
RODRIGUES, P. G. S. ....	295
RODRIGUEZ, A. D. ....	297
RODRIGUEZ, R. C. ....	277
ROMANO, R. A. ....	298
RONQUI, J. R. F. ....	86, 299
ROSA, R. G. T. ....	301
ROSELLÓ-MECHÓ, X. ....	369
ROSSETO, F. R. ....	302
ROSSETTI, R. F. ....	304, 363
RUGGIERO, C. A. ....	159, 330
RUSSIGNOLI, P. E. ....	290
<b>S</b>	
SABINO, F. P. ....	92, 306
SADRAEIAN, M. ....	308
SALAS, O. A. ....	310
SALCEDO, D. L. P. ....	311
SALLEO, A. ....	139
SALVIO, A. G. ....	290, 360
SAMPAIO, R. P. ....	312
SANDVIG, K. ....	252
SANTIAGO, R. T. ....	40
SANTOS, E. R. ....	313
SANTOS, F. A. ....	315
SANTOS, F. E. A. dos ....	122
SANTOS, J. C. C. ....	316
SANTOS, O. A. ....	317
SANTOS, T. M. ....	318
SBRISSA NETO, D. ....	360
SBRISSA NETO, D. A. ....	320
SCABINI, L. F. dos S. ....	322
SCHOSSLER, M. O. ....	323
SCIUTI, L. F. ....	57
SCORTECCI, J. F. ....	158, 324, 328
SEGATO, F. ....	253



SENESI, G. S. ....	288
SERENONE, W. M. ....	326
SERIDONIO, A. C. ....	183
SERRÃO, V. H. B. ....	71, 158, 324, 328
SERROR, P. ....	144
SHARMA, R. I. ....	273
SILVA JUNIOR, J. T. da ....	330
SILVA NETO, A. M. ....	332
SILVA, A. P. ....	334
SILVA, C. C. ....	44, 93, 201, 257
SILVA, D. L. ....	149
SILVA, D. M. D. D. ....	336
SILVA, E. E. D. ....	338
SILVA, G. R. ....	340
SILVA, I. A. ....	342
SILVA, J. L. F. ....	92, 306
SILVA, L. C. R. ....	286
SILVA, M. T. A. ....	94, 98
SILVA, M. T. A. da ....	209
SILVA, P. C. V. ....	277
SILVA, R. M. ....	344
SILVA, S. R. ....	345
SILVA, W. J. G. ....	66
SIMAS, A. M. ....	149
SIPAHI, G. M. ....	92, 112
SIQUEIRA, J. P. ....	225
SMAIRA, A. de F. ....	347
SOARES, P. M. ....	348
SOARES-PINTO, D. O. ....	90, 213, 222, 342
SOBREIRA, F. W. A. ....	350
SOUSA, M. A. M. ....	351
SOUZA FILHO, L. V. ....	370
SOUZA, A. M. ....	342
SOUZA, A. S. ....	352
SOUZA, A. V. G. ....	243
SOUZA, G. E. ....	354
SOUZA, M. L. de ....	356
SOUZA, P. V. B. D. ....	286
SOUZA, T. G. B. ....	358
SOUZA, V. ....	53, 96, 199, 226
STEFANI, I. H. Z. de ....	182
STELMASTCHUK, L. B. F. ....	165
STRINGASCI, M. D. ....	360
SUÁREZ BALLESTEROS, C. A. ....	361

<b>T</b>	
TANNÚS, A. ....	221, 286



TANNUS, A. ....	130
TAVARES, B. G. M. ....	362
TAVARES, L. C. ....	58
TAVARES, P. E. S. ....	175, 377
TEIZEIN, V. F. ....	363
TELLES, G. D. ....	175, 347, 377
TENORIO, J. C. ....	365
TEODORO, M. C. ....	366
TEODORO, M. D. ....	368
THIEMANN, O. H. ....	94, 98, 158, 165, 209, 312, 324, 328
THIEMMAN, O. H. ....	318
TITO, M. A. ....	362, 368
TODÃO, F. R. ....	60
TOMAZINI JÚNIOR, A. ....	51
TOMAZINI, A. ....	186
TOMAZIO, N. B. ....	369
TOMISHIYO, G. ....	370
TORRES, N. U. ....	371
TRAVIESO, G. ....	86, 159, 299
TREVIZAN, W. ....	372
U	
UEMURA, E. R. ....	261
ULIANA, C. ....	373
V	
VALENTE, G. T. ....	374
VANZELLA, D. ....	292
VANZELLA, D. A. T. ....	373
VARGAS, J. ....	376
VECCHI, M. ....	39, 216, 242
VIDOTO, E. ....	130
VIDOTO, E. L. G. ....	286
VIEIRA, N. C. S. ....	131, 315
VILLAS BOAS, P. R. ....	145, 171, 197
VILLAS-BOAS, P. R. ....	288
VIVANCO, F. A. J. ....	175
VIVANCO, F. J. ....	377
VIVERO-ESCOTO, J. L. ....	204
VOLLET FILHO, J. D. ....	290, 360
W	
WANDERLEY, A. B. ....	62
WEI, S.-H. ....	306
WILSON, B. C. ....	284
Y	
YOSHIOKA, A. K. ....	35



<b>YUCEL, Y. H.</b> .....	<b>284</b>
<b>Z</b>	
<b>ZAGO, L. A.</b> .....	<b>379</b>
<b>ZAMBIANCO, N.</b> .....	<b>315</b>
<b>ZANGIROLAMI, A. C.</b> .....	<b>380</b>
<b>ZAWADZKI, K.</b> .....	<b>382</b>
<b>ZERAIK, A. E.</b> .....	<b>123, 156, 164</b>
<b>ZILIO, S. C.</b> .....	<b>88</b>
<b>ZUCOLOTTO, V.</b> .....	<b>100, 131, 154, 214, 235, 293, 315, 317, 361</b>



SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP



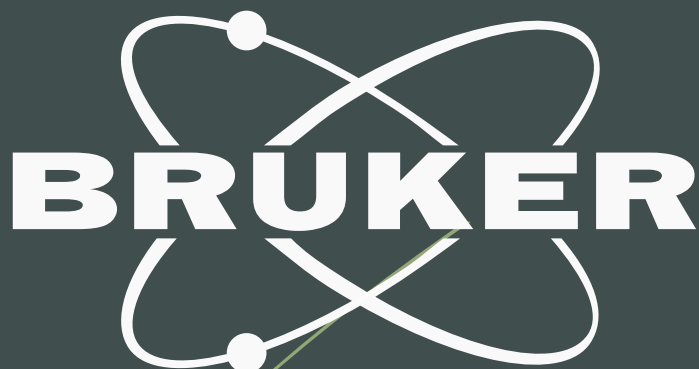
SIFSC 6, 03 a 07 de outubro 2016, São Carlos-SP

# Patrocínio



# HTM

PENSANDO TECNOLOGIA,  
PRODUZINDO QUALIDADE.



# THORLABS

 **CRISTÁLIA**  
*Sempre um passo à frente...*

  
**LAC**  
Artigos para Laboratório

 **novozymes**

  
Instituto  
Brasileiro  
de Linguas

# Apoio



**IFSC22** **ANOS**  
Sustentável

**USP**

**IFSC**  
J U N I O R

**SBIifsc**

**SIFSC.IFSC.USP.BR**