

LIVRO DE RESUMOS

SIFSC

DÉCIMA SEMANA INTEGRADA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO
DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO
CARLOS - USP



2020

Física e
Moleculares

Universidade de São Paulo Instituto de Física de São Carlos

X Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2020

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 10

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

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

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

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

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

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

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Felipe de Souza Macias

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Giulia Kassab

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Juliana Naomi Yamauti Costa

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Paulina Rossi Ferreira

Roberto Hiroshi Matos Furuta

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(10: 03 nov. - 05 nov. : 2020: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da X Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos/ Organizado por Arthur Deponte Zutião [et al.].
São Carlos: IFSC, 2020.
321 p.
Texto em português.
1. Física. I. Zutião, Arthur Deponte, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-0-9 CDD: 530

Carta de apresentação

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

Como de costume, uma das principais atrações da SIFSC é o Workshop da Pós-Graduação, já em sua 24^a edição, incluído no evento em 2011. Além de apresentações da Pós-Graduação, alunos de iniciação científica poderão apresentar seus trabalhos, sendo que a etapa local do XXVIII Simpósio Internacional de Iniciação Científica e Tecnológica da USP ocorre conjuntamente ao Workshop. Durante o Workshop, todos os estudantes são avaliados por professores e pós-doutorandos da área, a fim de acompanhar a evolução em seu projeto. O Workshop é de extrema importância na avaliação da CAPES, em que o instituto mantém nível de excelência por diversos anos.

Não sendo apenas de cunho acadêmico, o evento também serve como uma interface dos estudantes com o mercado de trabalho fora da universidade. Estimamos a participação de em torno de 400 pessoas, além de palestrantes, representantes de empresas e avaliadores. Esta interface, assim, se torna fundamental para ambos os lados, visto a quantidade de parcerias do instituto com empresas privadas.

Todos os alunos do instituto interessados poderão concorrer uma vaga no prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, nomeado em homenagem à uma das pioneiras da física em São Carlos, em que serão prestigiados os melhores trabalhos de cada etapa: graduação, mestrado e doutorado. Após uma fase preliminar, os trabalhos são apresentados à uma banca com representantes de todas as grandes áreas de pesquisa do instituto.

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

Comissão Organizadora da SIFSC 10

Lista de resumos

Workshop de Iniciação Científica

IC1 - Determinação de espectros de refração não linear de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica. MOYSÉS, R. ; MISOGUTI, L.	29
IC2 - Desenvolvimento de biossensor para detecção de Zika e Dengue COSTA, J. N. Y. ; NASCIMENTO, I. S. D. ; LINS, P. M. P. ; ZUCOLOTTI, V.	30
IC3 - Detecção de infecções de zika e dengue usando biossensores capacitivos e análise de componentes principais TAKEUTI, N. ; SAMPAIO, I. ; YAMAUTI, J. ; GUSSON, B. ; QUATRONI, F. D. ; ZUCOLOTTI, V.	31
IC4 - Interferometria e o gato de Cheshire quântico RUIZ, G. ; SOARES-PINTO, D. O.	32
IC5 - Propriedades magneto-ópticas em vidros CaLiBO MENEZES, B. C. ; RENATA, F. H. ; SANTOS, S. N. C. ; ALMEIDA, J. ; MENDONCA, C.	33
IC6 - Lorentz Invariance Violation in the context of astroparticle physics FIUSA, G. ; SOUZA, V. D. ; MARTÍNEZ-HUERTA, H.	34
IC7 - Desenvolvimento de um sistema quantitativo de Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser com pulsos de femtossegundos (fs-LIBS) BONI, L. D. ; GARCIA, R.	35
IC8 - Microfabricacao via laser de femtosegundos segundo para controle de molhabilidade em superficies CURVELO, K. ; PAULA, K.	36
IC9 - Magnetic island bifurcation in a visco-resistive MHD fluid ASNIS, Y. ; CANAL, G. ; EVANS, T.	37
IC10 - Estudo da Localização das Transferases de Glicosídeos epal e epaOX de Enterococcus faecalis por Microscopia Confocal VICENTE, M. L. F.	38

IC11 - Avaliação do mecanismo de ação do ácido ascórbico na agregação da A para tratamento da doença de Alzheimer QUATRONI, F. D. ; SAMPAIO, I. ; LINS, P. M. P. ; ZUCOLOTTO, V.	39
IC12 - Sistema de controle de temperatura da cavidade laser de titânio-safira em regime femtossegundo utilizando pastilhas de Peltier ALMEIDA, I. C. D. ; CASTRO NETO, J. C.	40
IC13 - Operadores de Moeller em colisões unidimensionais MOTTA, O. D. ; NAPOLITANO, R.	41
IC14 - Crescimento e caracterização de pontos quânticos auto-organizados de InAs LEMES, M. F. S. ; MAREGA, E.	42
IC15 - Avaliação da resposta da terapia fotodinâmica em modelos 3D de tumor de mama empregando a espectroscopia Raman MARQUES, M. J. D. A. M. ; KURACHI, C. ; CAMPOS, C. D. P. ; IERMAK, I.	43
IC16 - Resolvendo charadas cripto-aritméticas com algoritmos cooperativos REIS, L. A. ; FONTANARI, J. F.	44
IC17 - Mapeamento de funções metabólicas em células de câncer e saudáveis: Estudo da concentração e fração livre de NADH, taxa redox e co-localização de mitocôndrias SOUZA, G. ; ROMANO, R. ; KURACHI, C.	45
IC18 - Um estudo sobre algoritmos quânticos para a solução de equações diferenciais SENA, V.	46
IC19 - Influência da força iônica em interações de interface entre septinas parceiras FACIOLI, M. ; ARAÚJO, A. P. U. D.	47
IC20 - Interação de troca entre íons de cério decorrente da hibridização com elétrons de condução LÍBERO, V. L. ; PICOLI, F. D.	48
IC21 - Busca por matéria escura no Centro Galáctico com o Telescópio Espacial de Raios Gama Fermi OTTO, M. P. ; VIANA, A.	49
IC22 - Origem de íntrons spliceossomais: vestígios no genoma de um excavata REIS, R. D. ; MARCO, R. D.	50
IC23 - Propriedades eletrônicas de semicondutores a partir do estudo das simetrias dos grupos cristalinos. SALOMON, B. L. R. ; SIPAHI, G. M.	51

IC24 - Adaptação da detecção e programação para técnica de retroespalhamento de luz coerente.	
RAMOS, I. ; BONI, L. D.	52
IC25 - Investigando as concepções conceituais em conteúdos de Mecânica de alunos de graduação	
SILVA, A. C. ; MUNIZ, S. ; PAIVA, F. F.	53
IC26 - Tipagem molecular de bactérias gram-negativas carreando o gene blaKPC por eletroforese em gel com campos pulsados	
RIOS, A. L. V. ; BORALLI, C. M. D. S. ; CAMARGO, I.	54
IC27 - Fabricação de arcabouços 3D para o crescimento de filmes bacterianos	
MORAES, J. Q. R. ; OTUKA, A. J. G.	55
IC28 - Desenvolvimento de nanotubos de TiO₂ com diferentes geometrias aplicados na fotossíntese artificial	
SANTOS, A. M. ; GONÇALVES, R.	56
IC29 - Produção heteróloga e caracterização das xilanases da família GH10 e aplicações na degradação de xilano e produção de xilooligossacarídeos	
VACILOTTO, M. M. ; POLIKARPOV, I.	57
IC30 - Métodos para aprimorar as propriedades pseudo-aleatórias de mapas caóticos	
ALVARENGA, J. P. D. V. ; MACHICAO, J. ; BRUNO, O. M.	58
IC31 - Nanopartículas luminescentes por conversão ascendente de energia para aplicações em teranóstica	
BRAMBILLA, G. ; ARAI, M. ; MERIZIO, L. ; CAMARGO, A. D.	59
IC32 - Uma introdução ao fluxo de Ricci em superfícies	
TRINDADE, G. ; FERREIRA, C. H. G.	60
IC33 - Estudo do efeito de estímulos visuais em peixes elétricos de campo fraco <i>Gymnotus carapo</i>	
BELLINI, B. S. ; PINTO, R. D. ; ALMEIDA, L. B. D.	61
IC34 - Caracterizações espectroscópicas de uma nova classe de derivados de Corrois	
AKIYAMA, J. ; GALINDO, D. M. ; BONI, L. D.	62
IC35 - Uso de nanoemulsão de porfirina para o tratamento de infecções do trato respiratório com Terapia Fotodinâmica	
TOMÉ, A. J. B. ; KASSAB, G. ; TOVAR, J. S. D. ; JASINEVICIUS, G. O. ; BUZZÁ, H. H. ; BAGNATO, V. S. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C.	63

IC36 - Modelagem e fabricação via 2PP de acopladores ópticos direcionais JORGE, G. H. A. ; OTUKA, A. J. G.	64
IC37 - Implementação e manutenção de código computacional em framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores PAULI, I. G. ; SIPAHI, G. M.	65
IC38 - Avaliação microbiológica em estudo clínico de fase II: tratamento de faringotonsilite com ação fotodinâmica GIMENES FILHO, P. G. ; BLANCO, K. C.	66
IC39 - Estudos de toxicidade de nanorods para aplicações em nanomedicina ZUCOLOTTO, V. ; LINS, P. M. P. ; ALVES, J.	67
IC40 - Comparação de métodos para quantificação do efeito vascular da terapia fotodinâmica em modelo de membrana corioalantóica FERREIRA, G. C. ; BAGNATO, V. S. ; BUZZÁ, H. H.	68
IC41 - Estudos espectroscópicos de uma nova classe de porfirinas base livre KNOPKI, H. ; AKIYAMA, J. ; BONI, L. D.	69
IC42 - Caracterização da distribuição de elementos transponíveis no genoma de <i>Clostrorchis sinensis</i> MIASSI NETTO, L. ; MARCO, R. D.	70
IC43 - Modelo de convolução de sinais e obtenção da função resposta para determinação do tempo de fluorescência PEREIRA, V. A. M. C. ; BONI, L. D.	71
IC44 - Avaliação clínica de estudo clínico de fase II: tratamento de faringotonsilites causadas por <i>S. pyogenes</i> com ação fotodinâmica BASILE, D. ; BLANCO, K. C.	73
IC45 - Desenvolvimento de filmes de CuWO₄ e estudo das propriedades eletrônicas para aplicação na fotossíntese artificial RABELO, L. ; GONÇALVES, R.	74
IC46 - Introdução à física de buracos negros e a algumas soluções exóticas da relatividade geral RAIA NETO, M. ; BOTTI, L.	75
IC47 - Fabricação de estruturas periódicas via transferência direta a laser COUTO, F. ; MENDONCA, C.	76

IC48 - Produção de espécies reativas de oxigênio na combinação de Fotobiomodulação e Terapia Fotodinâmica COSTA, C. ; FARIA, C. ; BAGNATO, V. S.	77
IC49 - Machine learning optimization of a magneto-optical trap SANTOS, L. M. D. S. M. D. ; TELLES, G. D.	78
IC50 - Desenvolvimento de algoritmos de reconstrução de fase para microscópio óptico sem lentes OLIVEIRA, N. P. D. ; D'ALMEIDA, C. D. P. ; PRATAVIEIRA, S.	79
IC51 - Análise da distribuição do elemento de transposição SM1-alpha no genoma do parasita Schistosoma mansoni SANTOS, J. P. C. D. ; MARCO, R. D.	80
IC52 - Análise multiparamétrica do problema de fases em cristalografia de proteínas por aprendizado profundo. Caso de estudo: lisozima da clara do ovo de galinha JUCOVSKI, A. ; AMBROSIO, A.	81
IC53 - Uma análise da termodinâmica quântica de um dipolo interagindo com um pulso de fóton único NEVES, L. ; BRITO, F. B. D.	82
IC54 - Physarum polycephalum: o bolor inteligente POPULIM, M. S. ; FONTANARI, J. F.	83
IC55 - Desenvolvimento de software de controle para um microscópio óptico sem lentes. FEITOSA, P. ; PRATAVIEIRA, S. ; D'ALMEIDA, C. D. P.	84
IC56 - Produção de complexos de septinas de Ciona intestinalis STROZI, H. ; ARAUJO, A.	85
IC57 - Triagem in vitro de compostos ativos frente linhagem celular de câncer de mama triplo-negativa e metastática COSTA, F. R. F. D. ; SOUZA, M. S. ; ANDRICOPULO, A. D.	86
IC58 - Efeito do tempo de moagem sobre a estrutura e microestrutura de BaCO₃ ANDRADE, B. R. V. D. ; CLABEL, J. L. ; MAREGA, E.	88

Workshop da Pós-Graduação

PG1 - A high throughput, inexpensive and open-source biorreactor for optimization of recombinant protein expression FONTOLAN, L. S. B. ; THIEMANN, O. H.	89
PG2 - Correlações quânticas no modelo DQC1 GOETTEMS, E. I. ; DUZZIONI, E. I. ; MACIEL, T. O.	90
PG3 - Electromagnetically induced transparency in Rydberg atoms using Laguerre-Gaussian beams GOMES, N. D. ; MARCASSA, L. G.	91
PG4 - Estudo do transporte misto em transistores eletroquímicos orgânicos de PE-DOT:PSS COLUCCI, R. ; FARIA, G. ; GONÇALVES, R.	92
PG5 - Um estudo da absorção de dois fótons e das propriedades fotofísicas em compostos derivados de imidazo[4,5-b]pyridine PELOSI, A. ; COCCA, L. Z. ; ABEGAO, L. ; MENDONCA, C.	93
PG6 - Anderson localization of light in dimension d - 1 MÁXIMO, C. E. ; MOREIRA, N. A. ; KAISER, R. ; BACHELARD, R.	95
PG7 - Ultrafast excited state dynamics of Zn(II), Cu(II) and Co(II) metalloporphyrins SCIUTI, L. ; COCCA, L. Z. ; BONI, L. D.	96
PG8 - Otimização de atividades anti-biofilmes utilizando esterases de <i>Bacillus licheniformis</i> LEITE, A. E. T. ; POLIKARPOV, I.	97
PG9 - Purines bases analogs: a linear and nonlinear spectroscopic characterization aiming applications as emergent fluorescence bioprobes for studies at DNA and RNA molecules COCCA, L. Z. ; ABEGAO, L. ; SCIUTI, L. ; MENDONCA, C. ; BONI, L. D.	98
PG10 - Caminhos mínimos em redes complexas: Estrutura e otimização COMIN, C. H. ; DOMINGUES, G. S. ; COSTA, L. D. F.	99

PG11 - Algoritmos de aprendizagem de máquina aplicados a espectros Raman para a identificação de minérios de ferro QUEIROZ, A. A. A. E. D. ; ANDRADE, M. B. D.	100
PG12 - Dynamics of matter waves undergoing Bloch oscillations in a ring cavity BORGES, L. ; BACHELARD, R. ; COURTEILLE, P.	101
PG13 - White light emission and spectroscopic properties of tellurite-zinc glasses doped with Er^{3+} - Yb^{3+} - Tm^{3+} CALDERÓN, G. L. ; SILVA, O. D. B. ; GONÇALVES, R. R. ; MANZANI, D. ; RIVERA, V. A. G. ; MAREGA, E.	102
PG14 - Study of semiconductor AlN with Density Functional Theory BONANI, F. ; ALVES, H. ; SIPAHI, G. M.	103
PG15 - Assimetria compartilhada e o mecanismo de Page-Wootters CARMO, R. S. D. ; SOARES-PINTO, D. O.	104
PG16 - Diversidade de opiniões e bolha sociais no modelo de Sznajd adaptado BENATTI, A.	105
PG17 - QCD perturbativa em ordens altas no decaimento Higgs em dois fótons NEVES, G. A. D. ; BOITO, D.	106
PG18 - Determinação precisa da massa do quark c RODRIGUES, M. V. ; BOITO, D.	107
PG19 - Intra-scales energy transfer during the evolution of turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate OROZCO, A. D. G. ; MADEIRA, L. ; GALANTUCCI, L. ; BARENGHI, C. ; BAGNATO, V. S.	108
PG20 - A phase contrast method to shape light through optimal beam splitting SILVA, P. F. ; MUNIZ, S.	109
PG21 - QCD perturbativa em ordens altas no decaimento $H \rightarrow b\bar{b}$ LONDON, C. Y. M. ; BOITO, D.	110
PG22 - Spin relaxation of holes in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells TAVARES, B. ; POUSSEP, Y.	111
PG23 - Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes RIGHETTO, G. M. ; LEAL, T. C. ; LOPES, J. L. D. S. ; SANTOS-FILHO, N. A. ; BELTRAMINI, L. M. ; CILLI, E. M. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.	112

PG24 - Explorando macrófagos associados à leucemia promielocítica aguda como transportadores de nanoterapêuticos à células leucêmicas via interação de receptores CD44 e ácido hialurônico ANTONIO, L. C. ; RIBOVSKI, L. ; ZUCOLOTTI, V.	114
PG25 - Geometria diferencial e teoria da informação MAGNO, G. F. ; SOARES-PINTO, D. O. ; FERREIRA, C. H. G.	115
PG26 - Triagem virtual para descoberta de inibidores da Mpro de SARS-CoV-2 NOGUEIRA, V. ; FREIRE, M. C. L. C. ; SOUZA, G. ; FERRAZ, M. ; OLIVA, G. ; LINS, R. ; GUIDO, R. V. C.	116
PG27 - Study of quantum complexity in a purified system MORAZOTTI, N. ; NAPOLITANO, R.	117
PG28 - Descoberta de derivados de marinoquinolina como inibidores de Plasmodium falciparum SOUZA, G. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C. ; SANTO, R. D. E. ; BARBOSA, P. S. ; CAPITÃO, R. ; CORREIA, C. R.	118
PG29 - Fast rotating BEC in a ring trap TOMISHIYO, G. ; CARACANHAS, M. A.	119
PG30 - Influência das características de conectividade na execução distribuída de tarefas em redes complexas PASTORE, A. M.	120
PG31 - Avaliando a produção de raios cósmicos ultra energéticos em Centaurus A usando neutrinos e fótons secundários como mensageiros OLIVEIRA, C. ; SOUZA, V. D.	121
PG32 - Modelando brainstorm com sistemas quadro-negro SALHANI, J. A. S. ; FONTANARI, J. F.	122
PG33 - Superradiance, superabsorption and radiation-matter excitation interplay. DOURADO, R. ; YOUSSEF, M.	123
PG34 - Representação e caracterização de circuitos amplificadores operacionais através de grafos MIRANDA, W. M. ; COSTA, L. D. F.	124
PG35 - Otimização da terapia fotodinâmica para tratamento do melanoma cutâneo, analisando tipos de fotossensibilizadores e associação com agentes clareadores ópticos MARTINELLI, L. P.	125

PG36 - Caracterização e avaliação das propriedades tensoativas do biossurfactante produzido pela linhagem termohalofílica <i>Bacillus alveayuensis</i> isolada de rocha de reservatório de petróleo ARGENTIN, M. N. ; BOSSOLAN, N. R. S.	126
PG37 - piFlowMR: um protótipo baseado no modelo a fluxo de dados dinâmico, escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo TEIXEIRA, J. ; RUGGIERO, C. ; FERREIRA, F. ; MATIAS, P.	128
PG38 - Solid-state NMR on quadrupolar low gamma nucleus ²⁵Mg: applications to glasses DAMASCENO, H. R. ; ECKERT, H.	130
PG39 - Seleção de bactérias isoladas de um reservatório de petróleo brasileiro para a produção de biossurfactante: produção por diferentes substratos e avaliação das propriedades tensoativas FERREIRA, J. D. F. ; BOSSOLAN, N. R. S.	131
PG40 - Dinâmica de fluídos computacional integrada com imagem por ressonância magnética para simulações petrofísicas e fisiológicas SOLCIA, G. ; FOERSTER, B. U. ; ANDREETA, M. ; BONAGAMBA, T. J. ; PAIVA, F. F.	133
PG41 - Não-markovianidade, transições de fase e darwinismo quântico MARTINS, W. ; SOARES-PINTO, D. O.	134
PG42 - Produção e caracterização de nanocelulose obtida a partir de resíduos celulósicos utilizando enzimas ativas em carboidratos complexos CORTEZ, A. ; POLIKARPOV, I.	136
PG43 - Excitações topológicas quânticas em condensados de Bose-Einstein spinoriais DONATO, M. H. F. ; MUNIZ, S.	137
PG44 - Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein, capacidade térmica e Compressibilidade isotérmica MARTINS, E. E. B. ; TELLES, G. D.	138
PG45 - Interaction mechanisms in chemotherapeutic drugs and biomembrane models associated with drug resistance. SANTOS, K. F. D. ; MATERON, E. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	139
PG46 - Descoberta de compostos novos híbridos de marinoquinolina com derivados de artemisinina como inibidores de plasmodium falciparum ZANINI, C. ; CAPITÃO, R. ; SANTO, R. ; ROQUE, C. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C.	140

PG47 - Geodesic motion in a binary black-hole solution. CAPOBIANCO, R. ; HARTMANN, B.	141
PG48 - Avaliação da interação dos curcuminóides para terapia fotodinâmica antimicrobiana em bactérias patogênicas MELO, N. ; KURACHI, C. ; DIAS, L. ; INADA, N. M. ; SOARES, J. M.	142
PG49 - Combinação de antibiótico com inativação fotodinâmica para o tratamento de infecções bacterianas SOARES, J. M. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C.	143
PG50 - Investigação de uma LPMO9 de <i>Thermothelomyces thermophilus</i>: região-especificidade e ativação por luz. HIGASI, P. M. R. ; VELASCO, J. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; ARAÚJO, E. A. D. ; BRIGANTI, L. ; FRANÇA, B. A. ; KELLER, M. ; SEGATO, F. ; BLOSSOM, B. M.	144
PG51 - Bioestimulação de sementes de soja com luz de comprimento de onda 660 nm ODA, Y. S. ; CASTRO NETO, J. C.	145
PG52 - Excitações magnéticas em magnetos frustrados inomogêneos ALMEIDA, I. C. D. ; ANDRADE, E.	146
PG53 - Estudos biofísicos e estruturais das septinas de <i>Drosophila melanogaster</i> FERNANDES, A. ; CABREJOS, D. A. L. ; PEREIRA, H. D. ; GARRATT, R. C.	147
PG54 - Reconstruction of complex networks from causal information: analyzing, identifying, and distinguishing dependencies MARTINELLI, T. ; SOARES-PINTO, D. O. ; RODRIGUES, F. A.	148
PG55 - Desenvolvimento e implementação de métodos de processamento de imagens por ressonância magnética (RM) para obtenção de parâmetros relacionados à perfusão e à difusão COELHO, B. S.	149
PG56 - Automatização da otimização da técnica de contraste de fase para o desenho de potenciais ópticos em tempo real RAMPIM, A.	150
PG57 - Phenomenology of the propagation of astroparticles: Lorentz invariance violation and local sources of UHECR LANG, R. G. ; SOUZA, V. D.	151
PG58 - Theranostics nanomaterials coated with cell membrane for nanomedicine applications LINS, P. M. P. ; RIBOVSKI, L. ; CORSI, L. ; ZUCOLOTTO, V.	152

PG59 - Reconstrução de perfis longitudinais de chuveiros atmosféricos a partir de medições de luz Cherenkov.	
GILER, A. G. D. ; SOUZA, L. V. D.	153
PG60 - Self-duality in the context of the Skyrme model	
FERREIRA, L. A. ; LIVRAMENTO, L. R.	155
PG61 - Líquidos de spin via construção de partons	
SOBRAL, J. A. ; ANDRADE, E.	156
PG62 - Aplicação de imagens de ressonância magnética em meios porosos	
CARDOSO, C. ; PAIVA, F. F.	157
PG63 - Caracterização de elementos genéticos móveis envolvidos na transferência do gene blaKPC em bactérias gram-negativas de origem clínica.	
BORALLI, C. M. D. S. ; SILVA, G. V. D. ; ESQUÉN, P. I. H. ; RIOS, A. L. V. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.	159
PG64 - Inhibition of vitamin B6 biosynthesis enzymes from Staphylococcus aureus	
BARRA, A. L. C. ; NASCIMENTO, A. S.	161
PG65 - Observação do complexo hexamérico de septinas humanas por Crio-ME	
MENDONÇA, D. C. ; GARRATT, R. C. ; PORTUGAL, R. V.	163
PG66 - A monooxigenase lítica de polissacarídeo de Myceliophthora thermophila (MtLPMO9A) como modelo para LPMOs de alta eficiência em processos biotecnológicos.	
SEPULCHRO, A. G. V. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; POLIKARPOV, I.	164
PG67 - Implementação de um estado gato de Schrödinger de spin nuclear em um sistema quadrupolar via Ressonância Magnética Nuclear	
LEAL, A. C. D. S. ; BONAGAMBA, T. J.	165
PG68 - A Bayesian framework of reaction networks for biochemical models	
ARAUJO, G. ; MAIA, L. P.	166
PG69 - Caracterização biofísica de ORC1/CDC6 e Pol de Trypanosoma cruzi	
LEÃO, M. ; THIEMANN, O. H.	167
PG70 - Gold nanoparticles onto glass substrates for plasmonic biosensing applications	
OITICICA, P. R. A. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	168
PG71 - Teoremas de flutuação para o calor em termodinâmica quântica: uma abordagem por integral de trajetória	
AFONSO, R. ; SOARES-PINTO, D. O.	169

PG72 - Influence of crosslinking agents on the ionic and electronic conductivity of PEDOT: PSS for application in Bioelectronics: would the literature be doing the best choice? SOUZA, R. F. S. D. ; FARIA, G.	170
PG73 - Estudo da interação entre água do mar calibrada, petróleo e rochas carbonáticas através de espectroscopia vibracional não-linear (SFG) PALMA, N. ; MIRANDA, P. B.	171
PG74 - Aspectos informacionais da gravidade BORIN, D. ; VANZELLA, D.	172
PG75 - Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas humanas CABREJOS, D. A. L. ; ANDRÉ, I. ; VALADARES, N. ; USON, I. ; PEREIRA, H. D. ; GARRATT, R. C.	173
PG76 - Optical trapping of micro and nanoparticles and development of dynamic optical potentials MARTINS, T. T. ; SILVA, P. F. ; MUNIZ, S.	174
PG77 - Uso de nanoemulsão de Indocianina Verde para o tratamento de pneumonia por terapia fotodinâmica JASINEVICIUS, G. O. ; TOVAR, J. S. D. ; KASSAB, G. ; KURACHI, C. ; TOMÉ, A. J. B. ; BAGNATO, V. S. ; INADA, N. M. ; BUZZÁ, H. H.	175
PG78 - Descoberta de candidatos antivirais baseados na estrutura da enzima NS5 RNA polimerase RNA-dependente do vírus da febre amarela GAWRILJUK, V. ; OLIVA, G. ; NOSKE, G. D. ; GODOY, A. S. D.	177
PG79 - Vórtices em superfícies curvas e fechadas BERETA, S.	178
PG80 - Uso de espectroscopia Raman: aplicações na análise de dentes reirradiados por radioterapia. MATTOS, V. S. ; SANTOS, T. T. D. ; CARVALHO, F. K. D. ; CASTRO NETO, J. C.	179
PG81 - Caracterizando a complexidade de grafos e redes CUNHA, É. F. D. ; COSTA, L. D. F.	181
PG82 - Ultracold gases mixtures in mixed dimensions CHAVIGURI, J. R. H. ; CARACANHAS, M. A.	182

PG83 - Pseudo-hermiticidade: hamiltonianos não-hermitianos com espectro real além da PT-simetria	
SILVA, L. ; DOURADO, R. ; MOUSSA, M.	183
PG84 - Thermoelectric properties of a nanostructured device	
FERRARI, A. L. ; OLIVEIRA, L. N. D.	184
PG85 - Different molecular interactions and in vitro cytotoxicity of PLGA-ALA nano-particle systems	
SILVA, G. R. D. ; SANTOS, A. L. D. ; SANTOS, M. C. D. ; SANTOS, S. C. D. ; LIMA, V. R. D. ; INADA, N. M.	185
PG86 - Simulation of extensive air showers and its detection	
ARBELETCHÉ, L. ; SOUZA, V. D.	186
PG87 - Estudos estruturais e funcionais da enzima EfTenA: uma tiaminase tipo II de <i>Enterococcus faecalis</i>	
GUTIERREZ, R. R. F. ; NASCIMENTO, A. S. ; WRENGER, C.	187
PG88 - Métodos computacionais para detecção de toxicidade em <i>Tradescantia minima</i> por nanopartículas de prata (AgNPs) e cloreto de sódio (NaCl)	
GAMBOA, C. G. ; BRUNO, O. M.	188
PG89 - Avaliação do potencial fotocatalítico de nanocubos de SrTiO₃ dopados com Mo para produção de H₂ combustível	
CENTURION, H. A. ; GONÇALVES, R. V.	189
PG90 - O papel do emaranhamento em um motor de Szilard quântico	
SILVA, L. D. A. D. J. ; BRITO, F. B. D.	190
PG91 - Simulação de Armadilha Magneto-Óptica em geometrias não-convencionais operando próximo ao limite fotônico	
SANTOS, B. N. ; HENN, E.	191
PG92 - Radiação de cargas uniformemente aceleradas	
WESTIN, R.	192
PG93 - Laser de interação efetiva	
OLIVEIRA NETO, F. de ; YOUSSEF, M.	193
PG94 - Cluster epa de <i>Enterococcus faecalis</i>	
DANTAS, L. ; NASCIMENTO, A. S.	194
PG95 - Estudos de nanotermodinâmica e informação em pinças ópticas	
KAMIZAKI, L.	195

PG96 - Distribuição de luz na pele com um objeto refletivo em sua superfície usando simulações de Monte Carlo FORTUNATO, T. C. ; MORIYAMA, L. T.	196
PG97 - Chiroptical properties in plasmonic and high-refractive-index dielectric nanostructures SARRIA, J. J. H. ; SALAZAR, J. R. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	197
PG98 - Análise exploratória de imagens do Biossensor aplicado ao diagnóstico de câncer de próstata BRAZ, D. C. ; RODRIGUES, V. C. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	198
PG99 - Maleabilidade de redes complexas ao longo de sucessivas remoções de arestas FURUTA, R. H. M. ; COSTA, L. D. F.	199
PG100 - Fenômenos de transporte de única molécula através de um nanoporo em filme polimérico. ZAGO, L. A. ; GUIMARAES, F. E. G.	200
PG101 - Fotobiomodulação como potencializadora da radioterapia: um estudo pré-clínico FARIA, C. ; AVÓ, L. R. D. S. D. ; BAGNATO, V. S.	201
PG102 - Optimization of temperature for 39 K: The Gray Molasses technique BAGNATO, V. S. ; SALCEDO, E. G. I. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; CASTILHO, P. C. M. ; OLIVEIRA, G. A. D. ; MAZO, P. ; FARIAS, K. M.	202
PG103 - Artificial neural networks and complex networks: an integrative study of topological properties and pattern recognition SCABINI, L. ; BRUNO, O. M.	203
PG104 - Terapia fotodinâmica antimicrobiana da pneumonia bacteriana com nebulização e iluminação extracorpórea: eficiência da entrega e aspectos de segurança KASSAB, G. ; TOVAR, J. S. D. ; BUZZÁ, H. H. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.	204
PG105 - Resfriamento ótico ro-vibracional de um feixe supersônico de Rb2. TORRES, M. L. ; MARCASSA, L. G.	205
PG106 - On the laws of thermodynamics in the quantum regime MALVAZI, A. H. A. ; BRITO, F. B. D.	206
PG107 - Effect of deposition parameters on the gas sensing properties of In₂O₃-Sn₂O₂ (ITO) compound. HERNANDEZ, L. E.	207

PG108 - Nitrogen-Vacancy center in diamonds and its quantum applications. ANDRADE, L.	208
PG109 - Relations between the Ernst potentials and multipole moments in electrovacuum case COSTA FILHO, E. da ; HARTMANN, B.	209
PG110 - Triagem in vitro de derivados heterocíclicos em linhagens tumorais metastáticas não-responsivas ao tratamento SOUZA, M. ; CAPRETZ-AGY, A. ; FERNANDES, F. S. ; RODRIGUES JUNIOR, M. T. ; COELHO, F. ; ANDRICOPULO, A. D.	210
PG111 - Estratégias em quimioinformática para uma série de compostos antichagásicos MEDEIROS, A. ; ANDRICOPULO, A. D.	212
PG112 - O princípio de incerteza energia-tempo a partir de relações entrópicas RODRIGUES, N. E. ; SOARES-PINTO, D. O.	213
PG113 - Estudo da glicosiltransferase LafB de Enterococcus faecium envolvida na supersensibilidade a daptomicina ESQUÉN, P. I. H. ; MUNIZ, J. R. C. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.	214
PG114 - Disorder-driven delocalization of collective modes in the Bose-Hubbard model GETELINA, J. ; HOYOS, J.	215
PG115 - Is it better to increase the analytical signal or the surface area for ultrasensitive detection of cancer biomarkers using immunosensors based on screen-printed electrodes and NiFe₂O₂ nanoparticles? REDIN, G. G. I. ; GONÇALVES, D.	216
PG116 - Molecular dynamic simulations of drug interactions with membrane models ZAPATA, J. C. B. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; MOURA, A. F. D.	217
PG117 - Descoberta e desenvolvimento de candidatos antivirais contra o vírus da febre amarela baseados na estrutura do complexo NS2B-NS3 protease NOSKE, G. D. ; OLIVA, G. ; GODOY, A. S. D. ; OLIVEIRA, V. G. F.	218
PG118 - Avaliação da atividade de inibidores sintéticos em glutaminases RODRIGUES, C. T. ; DIAS, S. M. G. ; AMBROSIO, A.	219
PG119 - Análise da influência de elementos de transposição do clado CR1 na arquitetura do genoma do Schistosoma mansoni CHEROBIN, E. ; MARCO, R. D.	220

PG120 - Abordagem NRG para o cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica.	
DINIZ, G. ; OLIVEIRA, L. N. D.	221
PG121 - Nuvens-Q carregadas ao redor de buracos negros esfericamente simétricos e estáticos	
CONSOLE, F. ; HARTMANN, B.	223
PG122 - Expressão, purificação e busca de ligantes inibidores da proteína PLpro do vírus SARS-CoV-2	
FREIRE, M. C. L. C. ; NOSKE, G. D. ; OLIVEIRA, V. G. F. ; NAKAMURA, A. ; GODOY, A. S. D. ; OLIVA, G.	224
PG123 - Estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido a quebra da invariância de Lorentz	
CASTILHO, R. R. ; HUERTA, H. M.	225
PG124 - Caracterização estrutural e funcional de três enzimas com potencial uso biotecnológico da rota biossintética D-manose / L-galactose do ácido L-ascórbico de <i>Myrciaria dubia</i> “camu-camu”.	
GARRATT, R. C. ; CABREJOS, D. A. L. ; SANTILLAN, J. A. V. ; GÓMEZ, J. C. C.	226
PG125 - Physical and chemical properties of acid and acid-alkaline pretreated culms of sugarcane and energy cane varieties grown in Argentina and their correlation with the efficiencies of enzymatic hydrolysis	
KANE, A. O. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; SANTO, M. C. E. ; POLIKARPOV, I.	227
PG126 - Desacoplamento dinâmico contínuo generalizado: implementação	
HILARIO, A. ; NAPOLITANO, R.	228
PG127 - When clock and system interact: Page-Wootters’ mechanism	
MENDES, L. ; SOARES-PINTO, D. O.	229
PG128 - Espalhamento em grafos quânticos	
DRINKO, A. ; SOARES-PINTO, D. O.	230
PG129 - Coherent light-matter interaction in dense atomic clouds	
FERNANDEZ, M. F. ; COURTEILLE, P. ; TEIXEIRA, R. C. ; DIAS, P. G. S. ; MAGNANI, P. H. N.	231
PG130 - Correlation effects in the emergence of bound spin-state in the continuum	
GUESSI, L. H. B. ; OLIVEIRA, L. N. D.	232
PG131 - Influência da heterogeneidade das características de tarefas na sua execução distribuída em redes complexas	
LOPES, M. ; TRAVIESO, G.	234

PG132 - Analysis of extensive atmospheric showers SANTANA JUNIOR, A. B. de ; SOUZA, V. D.	235
PG133 - Evolução dirigida com linezolid e tedizolid da <i>Staphylococcus aureus</i> SA43, representante da linhagem ST5-SCCmecII, e comparação fenotípica de isolados derivados ZENATTI, L. ; DABUL, A. N. G. ; SILVA, G. V. D. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.	236
PG134 - Number and temperature improvement to achieve a two specie superfluid system of Na and K: the evaporative cooling of Na OLIVEIRA, G. A. D. ; FARIAS, K. M. ; CASTILHO, P. C. M. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; MAZO, P. ; BAGNATO, V. S. ; SALCEDO, E. G. I.	237
PG135 - Propriedades ópticas não-lineares de guias de onda produzidas por pulsos de femtossegundos em Gorilla® Glass HENRIQUE, F. R. ; ALMEIDA, G. F. B. D. ; MARTINS, R. J. ; ROSA, R. G. T. ; SIQUEIRA, J. D. P. ; ANDRADE, M. B. D. ; MENDONCA, C.	238
PG136 - Renormalons in integrated spectral function moments and strong coupling extractions OLIANI, F. ; BOITO, D.	239
PG137 - Purificação quântica através de um estado quádruplo para incluir ruído ambiental e aparato de medida na investigação do conceito de complexidade quântica AUDI, G. ; NAPOLITANO, R.	240
PG138 - Mapeamento do campo elétrico em transistores poliméricos por microscopia SFG SOUSA, M. S. ; MIRANDA, P. B.	241
PG139 - Nanopartículas funcionalizada com siRNA de um oncogene modulam os mecanismos antitumorais de macrófagos. COMPARETTI, E. ; ZUCOLOTTO, V.	242
PG140 - Estudo da mobilidade iônica e efeitos conformacionais de condutores mistos utilizando as técnicas de frente móvel e interferômetro de Michelson-Morley UNIGARRO, A. D. P. ; FARIA, G.	243
PG141 - Prospecção da interface de interação no processo de polimerização da enzima Glutaminase C ABREU, F. M. O. ; RODRIGUES, C. T. ; DIAS, S. M. G. ; AMBROSIO, A.	244
PG142 - NaTaO₃ dopado com Bi para a divisão fotocatalítica da água sob luz solar simulada: uma transição pseudo-cúbica induzida por dopagem ALVES, G. A. S. ; GONÇALVES, R. V.	245

PG143 - Efeitos de strain em semicondutores III-V SIQUEIRA, A. ; SIPAHI, G. M.	246
PG144 - Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos BARBOSA, M. G. ; VANZELLA, D.	247
PG145 - Quais os papéis da matemática no desenvolvimento científico? Uma história da “tese da matematização” FERRERIA, C. T. T. ; SILVA, C. C.	248
PG146 - The effects of WO₃ content in phosphate glasses on the energy transfer process between trivalent rare earth dopant ions FARIA, W. ; CAMARGO, A. D.	249
PG147 - Estudos de relação estrutura-atividade de derivados do Brussonol como candidatos a compostos líderes para a Malária BARBOSA, C. D. S. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C. ; AHMAD, A. ; BURTOLOSO, A. C. B.	250
PG148 - Perturbando o líquido de Ssin de Kitaev com desordem MEIRELES, V. D. ; ANDRADE, E.	251
PG149 - Energia de vácuo na cosmologia moderna OLIVEIRA, E. A. B.	252
PG150 - Tuning the feshbach resonances in a mixture of sodium and potassium: the implementation for ³⁹Potassium MAZO, P. ; FARIAS, K. M. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; SALCEDO, E. G. I. ; OLIVEIRA, G. A. D. ; CASTILHO, P. C. M. ; BAGNATO, V. S.	253
PG151 - Do brasileiro a polarização: usando geometria para revelar estruturas em grafos direcionados RESENDE, B. M. F. D. ; COSTA, L. D. F.	254
PG152 - Molecular recognition at septin interfaces: the switches hold the key LEONARDO, D. ; BROGNARA, G. ; BRANDÃO-NETO, J. ; PEREIRA, H. D. ; ARAUJO, A. P. ; GARRATT, R. C.	255
PG153 - Busca de padrões e aleatoriedades em criptografia usando sistemas dinâmicos BISPO JUNIOR, A. G. ; BRUNO, O. M.	256
PG154 - Modelo experimental de descontaminação de rins para trasplante GOENAGA, L. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.	257

PG155 - Band gaps beyond Anderson rule and imbalance of interlayer charge carrier transfer in van der Waals heterostructures of transition metal dichalcogenides BESSE, R. ; SILVEIRA, J. F. R. V. ; WEST, D. ; ZHANG, S. ; SILVA, J. L. F. D.	258
PG156 - Simulando observações de matéria escura no centro galático com observatórios atuais e futuros FORTES, G. ; VIANA, A.	260
PG157 - Epidemic modeling with adaptive mobile agents VENTURA, P. C. ; MORENO, Y. ; RODRIGUES, F. A.	261
PG158 - Optimization of Landau Gauge Fixing for SU(3) on the Lattice LEAL JUNIOR, J. M. ; CERQUEIRA, M. C. ; MENDES, T. C. D. R.	262
PG159 - Immobilization of photosensitizers at a polymeric materials and pre-clinical studies ZANGIROLAMI, A. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C.	263
PG160 - Towards a technical thermodynamics of an inhomogeneous gas of ultracold Bosonic atoms HEMMERLING, M. ; MIOTTI, M. ; ROMERO-ROCHÍN, V. ; BAGNATO, V. S.	264
PG161 - Study of a water-soluble high molecular weight chitosan on Langmuir monolayers JOHELAVICIUS, K. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	265
PG162 - Estratégias em modelagem molecular e avaliação biológica para uma série de candidatos à fármacos para a leishmaniose TELES, H. ; ANDRICOPULO, A. D.	266
PG163 - Desenvolvimento e otimização de fotoanodos de BiVO₄ aplicados à fotossíntese artificial para produção de hidrogênio combustível CORREA, A. D. S. ; GONÇALVES, R. V.	268
PG164 - Teoria de Yang-Mills-Higgs auto-dual modificada MALAVAZZI, H. ; FERREIRA, L. A.	270
PG165 - Glass and glass ceramics: structure study by advanced solid state NMR SANTOS, M. L. D. ; ECKERT, H.	271
PG166 - Desenvolvimento de um microscópio óptico holográfico sem lentes D'ALMEIDA, C. D. P. ; PRATAVIEIRA, S.	272
PG167 - Correlações gluônicas em teorias de Gauge na rede a temperatura finita CERQUEIRA, M. C. ; MENDES, T. C. D. R.	274

PG168 - Oscilações de Bloch de átomos de estrôncio ultra frios monitorados por meio de recuo atômico coletivo RIVERO, D. ; COURTEILLE, P.	275
PG169 - Análise dos efeitos sono-fotodinâmicos com PpIX: estudos in vitro e in vivo. VOLLET FILHO, J. D. ; PRATAVIEIRA, S. ; AYALA, E. T. P. ; BAGNATO, V. S. ; GARCIA, M. R. ; SOUSA, F. A. D. D.	276
PG170 - Efeitos da acidificação dos oceanos sobre a toxicidade das nanopartículas de óxido de Cério e Zinco (CeO₂ - ZnO) na microalga marinha Navicula sp. TUESTA, M. A. M. ; ZUCOLOTTI, V.	277
PG171 - Corrente persistente e torque por transferência de spin em heteroestruturas do tipo IT/FM ARAUJO, R. D. N. ; EGUES, C. ; ZANON, J.	278
PG172 - Framework para a determinação semiautomática de Hamiltonianos efetivos a partir de estruturas de bandas preexistentes WANDERLEY, A. B. ; SIPAHI, G. M. ; SILVA, J. L. F. D.	279
PG173 - Análise evolutiva e estrutural de genes associados ao diabetes tipo 02 MOTA, D. ; MARCO, R. D.	280
PG174 - Influência de algumas características topológicas na estabilidade e complexidade de redes neurais aleatórias. TEODOSIO, N. ; TRAVIESO, G.	281
PG175 - Estudo estrutural e funcional de hidrolases de glicosídeos celulosômicos termofílicas envolvidas no processo de hidrólise de biomassa lignocelulósica ALMEIDA, L. R. D. ; GARCIA, W. ; MUNIZ, J. R. C.	282
PG176 - Passeios quânticos NAVES, C. B. ; SOARES-PINTO, D. O.	284
PG177 - Cordas cósmicas com módulos excitados não-abelianos GREGORIO, G. M. ; HARTMANN, B.	285
PG178 - Dipolar Bose-Einstein condensate confined in spherically symmetric traps DINIZ, P.	286
PG179 - Automação de um FrontEnd de RMN para controle de periféricos em baixa velocidade MONTES, R. ; TANNUS, A.	287

PG180 - Da catálise à inibição: mecanismos enzimáticos e caracterização de potenciais inibidores da diadenilato ciclase de <i>S. aureus</i>: um novo alvo molecular essencial MENEGHELLO, R. ; NAVARRO, M. V. D. A. S.	288
PG181 - Caracterização de jamming avoidance response em gymotiformes e modelo de deflexão de seu campo elétrico em coespecíficos CESARINO, V. ; PINTO, R. D.	289
PG182 - Fase geométrica, efeito Aharonov-Bohm, e as bases da mecânica quântica ISRAEL, I. ; MAIA, L. P.	290
PG183 - Avaliação da radiação ultravioleta C para descontaminação de órgãos para transplante em modelos <i>in vitro</i> e <i>in vivo</i> GÁMEZ, Y. M. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S. ; KURACHI, C.	291
PG184 - Mudanças na rede de águas podem explicar a diferença de afinidade de ligação da colchicina com as isoformas II e III da tubulina SALCEDO, D. L. P. ; ANDRICOPULO, A. D.	292
PG185 - Search strategies and phase transitions in the random boolean satisfiability problem BITTENCOURT, H. D. ; FONTANARI, J. F.	294
PG186 - Route to a two species BEC NaK-39K GUTIERREZ, E. D. M. ; BAGNATO, V. S.	295
PG187 - Holographic superconductors APRILE, N. ; HARTMANN, B.	296
PG188 - Study of mixed ions effect in Cs₂O-Li₂O-SrO-P₂O₅ glasses by solid state NMR and impedance spectroscopy MORGUETTO, G. F. ; SCHNEIDER, J. F.	297
PG189 - Estudos estruturais, biofísicos e bioquímicos das septinas de levedura Cdc3, Cdc10, Cdc11 e Cdc12 SILVA, R. M. ; GARRATT, R. C.	298
PG190 - Low-cost disposable screen-printed carbon based electrochemical device for early diagnosis of colorectal cancer NASCIMENTO, G. ; MATERON, E. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	299
PG191 - Diagnóstico precoce e não invasivo de tumor usando nanossensores responsivos SILVA, E. C. ; ZUCOLOTTO, V.	300

PG192 - Bose-Einstein condensates and pseudo-potentials in bubble traps BIRAL, E. ; BAGNATO, V. S. ; SANTOS, F.	301
PG193 - Correntes de Wigner e quantificadores de não-classicalidade SILVA, C. F. ; BERNARDINI, A. E.	302
PG194 - Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas LUCHESE, A. C. F. ; BRUNO, O. M.	304
PG195 - Emulador para o espectrômetro digital do CIERMag MARTINS, M. J. ; TANNUS, A. ; VIDOTO, E. L. G. ; SOUZA, P.	305
PG196 - Desenvolvimento e validação de biossensores portáteis de baixo custo de anticorpo ou DNA para diagnóstico de doenças – dengue CAMARGO, M. A. D. ; GONÇALVES, D.	306
PG197 - Anderson localization in natural photonic crystals MATTOS, V. S. ; BAGNATO, V. S. ; CASTRO NETO, J. C. ; BARRERA-PATIÑO, C. P.	307
PG198 - Majorana Fermions in topological-insulators/superconductor heterostructures PUPIIM, L. ; EGUES, C.	308
PG199 - Engenheiro de ecossistema LOPES, G. ; FONTANARI, J. F.	309
PG200 - Estudos estruturais e funcionais em Xilose Isomerase BRIGANTI, L. ; MANZINE, L. ; POLIKARPOV, I.	310
PG201 - Hamiltoniano por formalismo $k \cdot p$ para estruturas Zinblende OLIVEIRA, C. E. D. ; SIPAHI, G. M.	311
PG202 - Spin transfer torque at topological insulator/ferromagnetic metal interfaces ZANON, J. ; EGUES, C.	312
PG203 - Using neural networks to forecast stock prices using simulated data SOUZA, H. R. D.	313
PG204 - Topological insulator/ferromagnetic metal junctions ARAUJO, R. D. N. ; EGUES, C.	314

IC1

Determinação de espectros de refração não linear de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica.

MOYSÉS, R. ; MISOGUTI, L.

renatomaframoses@usp.br

A fotônica tem grande importância para o desenvolvimento de novas e mais eficientes tecnologias, principalmente na área de comunicação, como em processamento de dados e em transmissão de informações. Neste sentido, há uma intensa pesquisa em novos materiais, na qual é extremamente importante ter conhecimento sobre suas características ópticas lineares e não lineares. Nesse projeto, nosso enfoque é a determinação do espectro de refração não linear (n_2) de soluções de corantes pelas medidas de rotação não linear da polarização elíptica (RNLPE). (1) Foram analisadas quatro soluções de corantes em metanol: DR13, DR1, DR19 e DO3 (todas na concentração de 0,01 mol/L). De maneira geral, os resultados foram satisfatórios, pois foi possível a determinação dos espectros de n_2 das soluções, a qual se mostrou interessante pelos espectros possuírem diferentes comportamentos conforme o comprimento de onda é variado. Ademais, levando-se em conta o valor da refração não linear do solvente (metanol) para diferentes comprimentos de onda (2), foi possível determinar o espectro de n_2 puro dos solutos. Grosso modo, os solutos possuem comportamentos similares, com intervalos onde seu n_2 é positivo, negativo ou aproximadamente nulo. Além disso, aproveitou-se da técnica de medidas RNLPE e dos resultados obtidos de n_2 para também determinar os espectros de absorção não linear (β) das soluções. (3) Essas medidas também foram satisfatórias, observou-se curvas semelhantes para os espectros de β das quatro soluções de corantes, com variação de acordo com o comprimento de onda e com comportamentos “inversos” aos encontrados para n_2 . Em conclusão, a técnica de medidas RNLPE é extremamente eficiente para a caracterização de soluções de corantes e com isso, futuramente, poderá ser estendida para outros diferentes corantes em diferentes solventes, já que os resultados motivam a obtenção de novas medidas para determinação de modelos para o comportamento teórico de ambos espectros para as soluções.

Referências:

1 MIGUEZ, M. L.; BARBANO, E. C.; COURA, J. A.; ZILIO, S. C.; MISOGUTI, L. Nonlinear ellipse rotation measurements in optical thick samples. **Applied Physics B : laser and optics**, v. 120, p. 653-658, 2015. DOI: 10.1007/s00340-015-6178-x. 2 MELHADO, M.S.; BARBANO, E.C.; VIVAS, M.G.; ZILIO, S.C.; MISOGUTI, L. Absolute nonlinear refractive index spectra determination of organic molecules in solutions. **Journal of Physical Chemistry A**, v. 123, n. 4, p. 951-957, 2019. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b10984. 3 DE BONI, L.; MISOGUTI, L.; ZILIO, S. C.; MENDONÇA, C. R. Degenerate two-photon absorption spectra in azaromatic compounds. **Chemphyschem**, v. 6, n.6, 2005. DOI: 10.1002/cphc.200400391.

IC2

Desenvolvimento de biossensor para detecção de Zika e Dengue

COSTA, J. N. Y. ; NASCIMENTO, I. S. D. ; LINS, P. M. P. ; ZUCOLOTTI, V.

juliananaomi@usp.br

Zika e Dengue são doenças causadas por vírus da família Flaviviridae e transmitidas principalmente pelos mosquitos *Aedes aegypti*. Possuem alcance global e atingem essencialmente regiões tropicais e subtropicais, como o Brasil, onde as condições climáticas favorecem o ciclo do mosquito. (1) Apesar da existência de técnicas de detecção, como o teste imunoenzimático ELISA, ou RT-PCR (do Inglês, reverse transcriptase - polymerase chain reaction), elas apresentam alto custo e os resultados são demorados, inviabilizando o diagnóstico amplo no sistema público de saúde. (2) A identificação do vírus, além de assegurar o correto tratamento da doença, é importante para a atualização dos dados epidemiológicos que permitem a avaliação da eficiência das medidas de combate aos vetores e, especialmente, para mulheres que desejam engravidar, visto que a infecção por Zika está associada ao possível desenvolvimento de microcefalia. Biossensores representam uma alternativa rápida e de baixo custo para a detecção de Dengue e Zika e, dentre eles, os biossensores colorimétricos mostram diversas vantagens, como rapidez na obtenção dos resultados, equipamentos simples e baixo nível de especialização para manuseio. Nanomateriais têm sido amplamente associados a biossensores devido suas propriedades ópticas e eletrônicas, especialmente a superfície de ressonância plasmônica (SPR), potencializando seu desempenho. (3) Dessa forma, este projeto tem como principal objetivo o desenvolvimento de um biossensor colorimétrico que se baseia na agregação de nanopartículas (AuNPs) e nanorods de ouro (AuNRs), funcionalizados com sequências de DNA específicas que atuam como sítios de reconhecimento - tendo como foco o monitoramento da banda de SPR na presença do analito. Assim, operam como indicadores colorimétricos da infecção por Zika e Dengue, e destacam-se pela sua inovação devido à formação de um sistema híbrido, o qual se espera que seja capaz de detectar e diferenciar ambas as doenças.

Referências:

1 WILDER-SMITH, A. *et al.* Dengue. **The Lancet** , v. 393, n. 10169, p. 350-363, Jan. 2019. 2 FARIA, H. A. M.; ZUCOLOTTI, V. Label-free electrochemical DNA biosensor for Zika virus identification. **Biosensors Bioelectronics** , v. 131, p. 149-155, Apr. 2019. 3 LIN, Y.-W.; LIU, C.-W.; CHANG, H.-T. DNA functionalized gold nanoparticles for bioanalysis. **Analytical Methods** , v. 1, n. 1, p. 14-24, Oct. 2009.

IC3

Detecção de infecções de zika e dengue usando biossensores capacitivos e análise de componentes principais

TAKEUTI, N. ; SAMPAIO, I. ; YAMAUTI, J. ; GUSSON, B. ; QUATRONI, F. D. ; ZUCOLOTTO, V.
naylanaomi@usp.br

Os casos de contágio pelos arbovírus da Zika e Dengue, transmitidos pelos mosquitos *Aedes aegypti*, aumentam mundialmente e sobrecarregam o sistema de saúde causando um enorme impacto socioeconômico. (1) Um dos principais desafios dos órgãos da saúde na obtenção de dados confiáveis sobre os casos de Zika e Dengue, têm sido a dificuldade de diagnóstico devido à similaridade dos sintomas entre as doenças. (2) O teste molecular (RT-PCR) e o teste sorológico (ex: ELISA) são as atuais formas de diagnóstico, contudo, são técnicas caras, demoradas e que exigem mão-de-obra especializada. Um diagnóstico diferencial, simples e de baixo-custo é de extrema importância para assegurar o tratamento adequado aos pacientes, além de monitorar e prevenir a doença. (3) Esse projeto visa o desenvolvimento de imunossensores elétricos para a detecção das proteínas NS1 dos vírus da Zika e da Dengue. Eletrodos interdigitados de ouro foram utilizados para montar três unidades sensoriais: 1) com anticorpos específicos das doenças (AC); 2) filme orgânico, ou seja, sem anticorpos (FO); e 3) sem modificação (eletrodo limpo). As unidades sensoriais foram submetidas a medidas de capacitância elétrica após a interação com as amostras positiva (proteínas alvo), negativa (proteínas do outro vírus) e de solução tampão (PBS). Para avaliar a discriminação das amostras, utilizou-se a análise estatística pelo método de componentes principais (PCA). Os dois imunossensores desenvolvidos são capazes de discriminar amostras contendo as proteínas alvo de amostras com proteínas semelhantes, conclui-se que os dispositivos são promissores para o diagnóstico rápido, simples e preciso das doenças com grande potencial para implementação no sistema público de saúde.

Referências:

1 ORGANIZAÇÃO PAN-AMERICANA DE SAÚDE. **Casos de dengue nas Américas chegam a 1,6 milhão, o que destaca a necessidade do controle de mosquitos durante a pandemia** . Disponível em: https://www.paho.org/bra/index.php?option=com_contentview=articleid=6205:casos-de-dengue-nas-americas-chegam-a-1-6-milhao-o-que-destaca-a-necessidade-do-controle-de-mosquitos-durante-a-pandemiaitemid=812. Acesso em: 17 set. 2020. 2 COLLINS, M. H.; WAGGONER, J. J. Detecting vertical Zika transmission: emerging diagnostic approaches for an emerged flavivirus. **ACS Infectious Diseases** , v. 5, n. 7, p. 1055-1069, 2019. 3 RONKAINEN, N. J.; HALSALL, H. B.; HEINEMAN, W. R. Electrochemical biosensors. **Chemical Society Reviews** , v. 39 , n. 5, p. 1747-1763, 2010.

IC4

Interferometria e o gato de Cheshire quântico

RUIZ, G. ; SOARES-PINTO, D. O.

gabriela.ruiz@usp.br

Recentemente, Aharonov e colegas publicaram um artigo (1) chamando atenção para um efeito interessantíssimo: num experimento de interferometria seria possível separar um fótons de sua polarização. Esse efeito foi batizado de gato de Cheshire inspirado no gato do conto “Alice no país das maravilhas” onde se apresenta um gato separado de seu sorriso. Tal efeito chamou muita atenção na literatura quer por ser algo curioso quer pelo bom humor dos autores de conectar com um livro infantil. Neste projeto, nos propusemos a estudar os fundamentos da teoria quântica que antecede este resultado, em especial as medições de valores fracos (2), assim como investigar o resultado e apresentar variações do interferômetro que possibilitaram construções alternativas do gato de Cheshire quântico, sobretudo o caso proposto por Guryanova (3), assim como realizações experimentais e discussões da realidade dos resultados estudados.

Referências:

1 AHARONOV, Y. *et al* . Quantum cheshire cats. **New Journal of Physics** , v. 15, n. 11, p. 113015-1-113015-9, Nov. 2013. 2 AHARONOV, Y.; ALBERT, D. Z.; VAIDMAN, L. How the result of a measurement of a component of the spin of a spin-1/2 particle can turn out to be 100. **Physical Review Letters** , v. 60, n. 14, p. 1351-1354, Apr. 1988. 3 GURYANOVA, Y.; BRUNNER, N.; POPESCU, S. **The complete quantum Cheshire cat** . 2012. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1203.4215>. Acesso em: 17 set. 2020.

IC5

Propriedades magneto-ópticas em vidros CaLiBO

MENEZES, B. C. ; RENATA, F. H. ; SANTOS, S. N. C. ; ALMEIDA, J. ; MENDONCA, C.

beatrizcm01@usp.br

O impacto tecnológico da Fotônica se faz presente desde dispositivos para comunicações ópticas até aplicações em medicina, tendo ainda relevante repercussão econômica em nível mundial. Este projeto possui como objetivo, em seu caráter introdutório, a caracterização de propriedades de materiais de interesse para o desenvolvimento de dispositivos. Em particular, vidros e cristais são muito visados para aplicações em dispositivos fotônicos. Os vidros com propriedades magneto-ópticas, que são o objeto de estudo desta pesquisa, apresentam atividade óptica induzida por campos magnéticos (efeito Faraday), possuindo aplicação como isoladores ópticos e moduladores de luz. (1) Neste projeto, em um primeiro estágio, foi realizada a caracterização de vidros tetraborato de cálcio-lítio (CaLiBO) dopados com diferentes concentrações de íons Tb^{3+} (1 e 2%), que apresentam efeito Faraday, através da determinação da constante de Verdet das amostras. Apresentamos também os objetivos da segunda etapa do projeto, em que serão produzidas guias ópticas com pulsos de femtossegundos nestes vidros, as quais também terão suas propriedades magneto-ópticas avaliadas. A partir dos estudos realizados, foi possível obter familiarização com conceitos de óptica linear e não-linear, bem como o desenvolvimento experimental através do estudo do efeito Faraday. Obtivemos, para as amostras CaLiBO 1 e 2% respectivamente, o valor médio da constante de Verdet como sendo $(240 \pm 20)T^{-1}m^{-1}$ e $(670 \pm 10)T^{-1}m^{-1}$. Esses resultados encontram-se de acordo com as estimativas feitas (2) e mostraram-se relevantes para dar continuidade às investigações das propriedades magneto-ópticas desses vidros.

Referências:

1 BALLATO, J.; SNITZER, E. Fabrication of fibers with high rare-earth concentrations for Faraday isolator applications. **Applied Optics**, v. 34, n. 30, p. 6848-6854, 1995. 2 YAMANE, M.; ASAHARA, Y. **Glasses for photonics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.

IC6

Lorentz Invariance Violation in the context of astroparticle physics

FIUSA, G. ; SOUZA, V. D. ; MARTÍNEZ-HUERTA, H.

gcafiusa@gmail.com

The fundamental interactions of nature are described in terms of two experimentally consolidated theories, General Relativity, which is a geometric theory that describes gravity, and the Standard Model, which consists of Quantum Field Theories describing electromagnetism, the weak and strong nuclear interactions. The two theories are fundamentally different and therefore incompatible. A unifying scenario has motivated theoretical physicists to propose new theories such as String Theory and Loop Quantum Gravity, which include new physics such as higher dimensions of spacetime, non-commutative geometries, and the violation of fundamental principles such as Lorentz covariance.(1) The effects of Lorentz-symmetry breaking are expected to happen at very high energies, and thus, astrophysical phenomena become important candidates to explore those effects. In this work, considering the unprecedented experimental precision of the Cherenkov Telescope Array (2), we explore differences on the time of flight of high-energy photons propagating from distant Gamma-Ray Bursts, imposing the limit $E_{QG} \simeq 4.75 \times 10^{28}$ eV on Lorentz Invariance Violation, this limit agrees with previous results from the literature. (3)

Referências:

1 COLEMAN, S.; GLASHOW, S. L. High-energy tests of Lorentz invariance. **Physical Review D**, American Physical Society (APS), v. 59, n. 11, 1999. 2 DORO, M. *et al*. Dark matter and fundamental physics with the Cherenkov Telescope Array. **Astroparticle. Physics**, v. 43, p. 189–214, 201, 2013. 3VASILEIOU, V. *et al*. Constraints on Lorentz invariance violation from Fermi large area Telescope observations of gamma-ray bursts. **Physical Review D**, American Physical Society (APS), v. 87, n. 12, 2013.

IC7

Desenvolvimento de um sistema quantitativo de Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser com pulsos de femtossegundos (fs-LIBS)

BONI, L. D. ; GARCIA, R.

rafaelgarcia@usp.br

A Espectroscopia de Plasma Induzido por Laser (LIBS) é uma técnica de espectroscopia de emissão atômica muito versátil, que permite fazer análises rápidas, sem preparação prévia (in situ), e não destrutiva, dos elementos químicos de uma amostra.(1) O objetivo deste trabalho foi montar a técnica de fs-LIBS, que faz uso de um laser de femtossegundos e abre um leque de diferentes aplicações. Em anos anteriores, foi possível implementar toda a etapa instrumental do LIBS e, nesse último período de iniciação científica, estudou-se modelos de análise quantitativa, com o objetivo de se extrair propriedades dos plasmas de LIBS, como a estequiometria, temperatura e densidade de elétrons. Ao se analisar uma amostra de latão, diversas condições de focalização e ablação mostraram que os plasmas formados seguem consideravelmente equilíbrio termodinâmico local (LTE), uma hipótese de análise vantajosa por fornecer muita informação termodinâmica e também por ser autocalibrada por cada plasma. (1) Ademais, desenvolveu-se um simulador de espectros de plasmas em LTE que faz uso da base de dados da NIST. Futuramente, aplicará-se o sistema LIBS e a análise via LTE para obter propriedades dos plasmas gerados em modificação estrutural de semicondutores via laser de femtossegundos. (2) Possivelmente, será possível associar as propriedades do plasma às modificações estruturais geradas em Ag₃VO₄, o material que se deseja estudar. Mais que isso, os espectros simulados indicam que será possível obter uma caracterização completa dos plasmas da substância se a condição de LTE for respeitada.

Referências:

1 MIZIOLEK, A.; PALLESCHI, V.; SCHECHTER, I. **Laser induced breakdown spectroscopy** . Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 2 ASSIS, M. *et al* . Towards the scale-up of the formation of nanoparticles on -Ag₂WO₄ with bactericidal properties by femtosecond laser irradiation. **Science Reports** , v. 8, p. 1884, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41598-018-19270-9>.

IC8

Microfabricacao via laser de femtosegundos segundo para controle de molhabilidade em superficies

CURVELO, K. ; PAULA, K.

kaue.lima.silva@usp.br

Decorrem de superficies com molhabilidade controlada infindas aplicações científicas e industriais, desde oportunidades com micro/nano fluidos a até proliferação celular. A microfabricação com laser de femtosegundos se apresenta como ótima alternativa para a modificação estrutural dessas superficies, devido a sua extrema localização espacial e diminutos efeitos térmicos devido aos pulsos ultracurtos. Este trabalho objetiva a estruturação superficial do polímero TFEMA-DR13 para controle de sua molhabilidade. TFEMA-DR13 (1) é um copolímero sintetizado via polimerização de radicais livres e possui alta estabilidade química e térmica. Posicionada a amostra em um estágio translacional $x-y-z$, um padrão periódico de micro pilares quadráticos é microfabricado em sua superfície, através de pulsos de laser de femtosegundos, focalizados por uma objetiva de microscópio (0.65NA). Além disso, uma câmera CCD alinhada com a objetiva de microscópio permite o monitoramento em tempo real do processo. Após determinação das melhores condições de microfabricação, a superfície do copolímero foi estruturada com 16nJ de energia por pulso e 50 $\mu\text{m/s}$ de velocidade de translação, desenvolvendo 4 regiões de 1 mm^2 com periodicidades variando de 20 a 50 μm . Medidas de ângulo de contato de gotas de água em cada região mostram um aumento significativo da hidrofobicidade da superfície conforme a periodicidade diminui, apresentando uma diminuição máxima de 19.3° no ângulo de contato entre a gota e a superfície estruturada. Assim, demonstra-se o controle da molhabilidade da superfície do polímero TFEMA-DR13, através da microfabricação via laser de femtosegundos.

Referências:

1 SANFELICE, R. C.; PAVINATTO, F. J.; CARDOSO, M. R.; MENDONÇA, C. R.; BALOGH, D. T.; OLIVEIRA, O. N Hydrophobic methacrylic copolymers containing azobenzene moieties. **Polymer** , v. 52, n. 21, p. 4703–4708, 2011.

IC9

Magnetic island bifurcation in a visco-resistive MHD fluid

ASNIS, Y. ; CANAL, G. ; EVANS, T.

yuriasnis@gmail.com

The potential of nuclear fusion to provide a practically inexhaustible source of clean and renewable energy has motivated scientists for many decades to work toward developing nuclear fusion power plants. Among many concepts, the so-called tokamak concept is, at present, the most promising approach for exploiting thermonuclear fusion. To become economically attractive, tokamaks will have to operate in the so-called high confinement mode, whose ubiquitous feature are repetitive instabilities known as edge localized modes (ELM). (1) These instabilities release unacceptably high fractions of the thermal energy of the plasma to the first wall of the device thus driving the need for ELM control strategies. Studies worldwide have demonstrated that the presence of relatively small non-axisymmetric resonant magnetic perturbations (RMP) can be used to suppress ELMs. (2) Recent calculations of the linear response of spherical tokamak plasmas to RMP fields using the resistive MHD code M3D-C1 revealed a new class of magnetic field line bifurcations that do not fit into the well-accepted magnetic reconnection theory. These results not only challenge reconnection theory in tokamak plasmas but are particularly important for understanding the underlying physics of self-organization in toroidal fusion plasmas. (3) This work provides an improved understanding of the mechanisms responsible for this new class of topological magnetic bifurcations via analytical calculations based on a toy model. Firstly, an analytical model was developed using the ideal MHD equations to understand the impact of non-resonant modes on resonant modes located at different rational surfaces. As a result, the non-resonant mode located at the $q = 2$ surface is causing a kinking in the magnetic field lines around the $q = 3$ surface. To see if this kink is helping the island to bifurcate, a new approach focusing on the resonant surfaces has started using a set of visco-resistive MHD equations. The ultimate goal of this work is to provide a better insight into the physics basis responsible for the island bifurcations observed in the M3D-C1 simulations.

Referências:

1 EVANS, T. E. *et al.* The physics of edge resonant magnetic perturbations in hot tokamak plasmas. **Physics of Plasmas** , v. 13, n. 5, p. 056121-1-056121-11, 2006. 2 EVANS, T. E. *et al.* **Observations of heteroclinic bifurcations in resistive MHD simulations of the plasma response to resonant magnetic perturbations** . 2018. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1805.10394>. 3 WU, W. *et al.* Topological bifurcation of magnetic islands in NSTX-U. **Nuclear Fusion** , v. 59, n. 6, p. 066010-1-066010-11, 2019.

IC10

Estudo da Localização das Transferases de Glicosídeos *epaE* e *epaOX* de *Enterococcus faecalis* por Microscopia Confocal

VICENTE, M. L. F.

maria.luiza.vicente@usp.br

Bactérias multirresistentes são um problema de saúde pública na atualidade. Entre os microrganismos que causam patologias multirresistentes temos o gênero *Enterococcus* como o segundo grupo de microrganismos que mais causa morte por infecções dessas doenças. (1) As proteínas do cluster *epa* de *Enterococcus faecalis* são uma nova alternativa para alvos de novos antibióticos, visto que sintetizam polissacarídeos que compõe a parede celular de *Enterococcus faecalis*, fator de virulência comprovados pela deleção de alguns genes dessas proteínas nos trabalhos de Dale e seus colaboradores (2) e Fang e seus colaboradores. (3) O estudo da localização celular das enzimas pode nortear estudos estruturais futuros e estratégias de expressão/purificação destas. Fusionando duas proteínas de interesse, *epaE* e *epaB*, respectivamente, glicose-1-fosfato timidiltransferase e glicosiltransferase, através da clonagem por LIC a GFP, foi possível inferir a localização celular dessas proteínas, classificando-as em citosólicas ou de membrana, através da visualização por microscopia óptica de fluorescência confocal. O vetor construído para essa transformação permitia a fluorescência da GFP ser repórter do enovelamento das proteínas de interesse e portanto, ao expressar os vetores em cepa Rosetta de *E.coli* a uma temperatura pós indução de 18°C inferiu-se que as proteínas tinham sido expressas e estavam enoveladas, permitindo a visualização da localização celular. Por fim, foi possível visualizar ambas as proteínas e mostrar que a *epaE* é uma proteína citosólica pois estava mais presente no citosol, além de estar concentrada em um lugar específico dele, a *epaB* estava presente em maior concentração na membrana celular e por isso caracterizou-se como uma proteína de membrana ou associada a ela, e portanto menos solúvel. Os testes de solubilidade das proteínas utilizando a GFP como repórter confirmaram a solubilidade da proteína citosólica *epaE* e também a insolubilidade da proteína encontrada na membrana *epaB*. Esses resultados podem auxiliar nas estratégias de purificação dessas proteínas além de ajudar nas estratégias para outras glicosiltransferases do cluster *epa*.

Referências:

1 WEINER, L. M. *et al* . Antimicrobial-resistant pathogens associated with healthcare-associated infections: summary of data reported to the National Healthcare Safety Network at the Centers for Disease Control and Prevention, 2011-2014. **Infection Control and Hospital Epidemiology** , v. 37, n. 11, p. 1288–1301, 2016. 2 DALE, J. L. *et al* . Multiple roles for *Enterococcus faecalis* glycosyltransferases in biofilm-associated antibiotic resistance, cell envelope integrity, and conjugative transfer. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy** , v. 59, n. 7, p. 4094–4105, 2015. 3 TENG, F. *et al* . Further characterization of the *epa* gene cluster and *epa* polysaccharides of *Enterococcus faecalis*. **Infection and Immunity** , v. 77, n. 9, p. 3759–3767, 2009.

IC11

Avaliação do mecanismo de ação do ácido ascórbico na agregação da A para tratamento da doença de Alzheimer

QUATRONI, F. D. ; SAMPAIO, I. ; LINS, P. M. P. ; ZUCOLOTTO, V.

felipequatroni@uol.com.br

Alzheimer (AD) é um distúrbio neurodegenerativo que acomete principalmente indivíduos de idade avançada. A principal causa desse distúrbio é a formação de placas fibrilares entorno dos neurônios devido ao acúmulo de peptídeos beta-amilóide ($A\beta$) no cérebro. (1) Diversos estudos mostraram que a $A\beta_{42}$ desempenha papel importante na defesa do organismo contra microrganismos que atravessam a barreira hematoencefálica. (2) Assim, tratamentos que atuem inibindo apenas a agregação da $A\beta_{42}$ se mostram uma alternativa mais adequada para o tratamento da AD. No estudo realizado anteriormente, "Avaliação de possíveis inibidores da agregação da $A\beta$ para tratamento da doença de Alzheimer", através das técnicas de microscopia de força atômica (AFM) e de fluorescência com Thioflavina mostramos que o ácido ascórbico (AA), um antioxidante comum ao organismo, pode causar uma diminuição significativa na formação de agregados da $A\beta_{42}$. Dessa forma, este estudo buscou determinar o mecanismo pelo qual o AA age diminuindo a formação das placas amilóides. Foram analisadas alterações na estrutura secundária do tipo folha- β da $A\beta_{42}$ através de medidas de espectroscopia de FTIR e dicroísmo circular (CD). Para isso, amostras de $A\beta_{42}$ com e sem AA foram incubadas por 72 h à 37°C, sendo realizadas análises a cada 24 h. A análise de CD mostrou que houve a formação de folhas- β a partir de 24 h de incubação para ambas as amostras estudadas, sem diferença significativa nos demais tempos analisados. Isso implica que a ação do AA, ao inibir a formação de agregados da $A\beta_{42}$, ocorre sem mudanças nas estruturas secundárias do peptídeo. Esses resultados foram corroborados através dos espectros de FTIR. Para determinar o tipo de interação, e os parâmetros termodinâmicos, entre os monômeros de $A\beta_{42}$ e as moléculas de AA, foi utilizada a calorimetria de titulação isotérmica (ITC). As isotermas geradas nas análises mostraram que ocorre uma interação em múltiplos sítios do peptídeo através de um modelo de ligação cooperativa positiva. Nesse modelo a afinidade de ligação, dada por K_a , aumenta através das sucessivas ligações de AA, ou seja, $K_{a2} > K_{a1}$. Além disso, os valores calculados de K_a foram significativamente maiores que vários agentes inibidores da agregação da $A\beta_{42}$. (3) Esse estudo mostrou que o AA é capaz de atenuar a agregação do peptídeo $A\beta_{42}$ através da ligação direta aos monômeros da $A\beta_{42}$ sem alterar sua estrutura secundária, demonstrando que o AA possui um alto potencial para o tratamento da AD. Além disso, a determinação de seu mecanismo de ação contribui também para que novos fármacos possam ser desenvolvidos para atuarem de maneira semelhante.

Referências:

1 EDWARDS, F. A. Unifying hypothesis for Alzheimer's disease: from plaques to neurodegeneration. *Trends in Neurosciences*, v. 42, n. 5, p. 310-322, May 2019. 2 GIRIDHARAN, V. V. *et al*. Infection-induced systemic inflammation is a potential driver of Alzheimer's disease progression. *Frontiers in Aging Neuroscience*, v. 11, p. 122-1-122-5, May 2019. 3 FAN, Q. *et al*. Ginnalin A inhibits aggregation, reverses fibrillogenesis, and alleviates cytotoxicity of amyloid (1-42). *ACS Chemical Neuroscience*, v. 11, n. 4, p. 638-647, Jan. 2020.

IC12

Sistema de controle de temperatura da cavidade laser de titânio-safira em regime femtossegundo utilizando pastilhas de Peltier

ALMEIDA, I. C. D. ; CASTRO NETO, J. C.

iagoc39@gmail.com

Este projeto visa o desenvolvimento do sistema de refrigeração a ar da cavidade laser de Titânio-Safira para operação em regime femtossegundo através de um laser de bombeamento DPSS Verdi/Coherent 532 nm, possibilitando a marcação a laser de superfícies metálicas e a criação de nanoestruturas periódicas que contam com diversas aplicações na indústria e na medicina. (1) O sistema de refrigeração é baseado na utilização de uma pastilha de Peltier, sendo o projeto do controle de temperatura da pastilha realizado através da resposta ao degrau do sistema térmico em malha aberta. A resposta ao degrau possibilita a estimação de uma função de transferência de primeira ordem através da ferramenta *ident* do *software* MATLAB, que, utilizando-se o método de projeto de controladores interativo *rltool*, possibilita a obtenção da função de transferência do controlador a ser utilizado em malha fechada através de realimentação do sinal de saída. Através de técnicas de controle digital, o controlador obtido será transferido do domínio da frequência complexa de Laplace para o domínio discreto Z conforme consta em (2), possibilitando sua descrição em termos de uma equação de diferença que pode ser implementada em um microcontrolador para a realização da lógica de controle. Ao fim do projeto do controlador, testes serão realizados através de simulações em ambiente *Simulink* para verificação da dinâmica obtida e, posteriormente, testes experimentais serão realizados para validação dos resultados. Quando da obtenção de resultados experimentais coerentes com os simulados, o sistema será testado com a incidência do laser no cristal de Titânio-Safira, sendo esperado que quaisquer variações na temperatura sejam compensadas através do sistema de controle da pastilha de Peltier, fazendo com que o cristal opere sempre na temperatura de referência desejada. O sucesso deste projeto possibilitará a substituição dos sistemas de refrigeração a água por refrigeração a ar, tornando os equipamentos mais compactos e facilitando sua mobilidade, por exemplo, no chão de fábrica de uma indústria.

Referências:

1 JWAD, T. *et al* . Laser induced ripples' gratings with angular periodicity for fabrication of diffraction holograms. **Applied Surface Science** , v. 453, p. 449-456, Sept. 2018. 2 ISERMANN, R. **Digital control systems** . Berlin: Springer-Verlag, 1981. 566 p.

IC13

Operadores de Moeller em colisões unidimensionais

MOTTA, O. D. ; NAPOLITANO, R.

octavio.motta@usp.br

Este trabalho se desenvolve em torno da teoria formal de espalhamento quântico, que envolve situações que não são meramente elásticas, fazendo-se necessário então o uso de um objeto matemático chamado matriz de espalhamento, um objeto que pode ser representado como um operador unitário. Cada elemento de matriz S descreve uma possível amplitude de um evento colisional ou, na linguagem de informação quântica, um input e outro output. O input está associado com os chamados "in-states" e os outputs, com os chamados "out-states". Os estados "in" são, normalmente, associados com o estado preparado no início da colisão e os "out" são associados com o estado detectado no futuro. Analogamente, para teoria de medidas fracas (1), temos o chamado formalismo de dois vetores de estado de Aharonov, os estados "in" e "out" são associados com o que foi preparado no passado e ao estado que será detectado no futuro, respectivamente. Esta proposta (2) faz a interpretação desses dois estados da teoria de medidas fracas, dentro do formalismo de dois vetores de estado, em termos dos operadores de Moeller. A matriz de espalhamento pode ser escrita como o produto de dois operadores de Moeller. Um deles é obtido por um processo limite do propagador do tempo infinitamente no passado ao momento da colisão, enquanto o outro é obtido pelo processo limite do propagador do tempo infinitamente no futuro para o momento da colisão. Diga-se ainda que essa formulação é conhecida em teoria formal de colisões mas ainda não foi completamente incorporado no contexto das novas abordagens em termos de teoria de medidas fracas e mesmo de informação quântica. Neste trabalho foram elaborados os cálculos desses dois operadores em uma dimensão espacial, mas considerando que a partícula tenha dois estados internos, como um qubit.

Referências:

1 AHARONOV, Y.; POPESCU, S.; TOLLAKSEN, J. A time-symmetric formulation of quantum mechanics. **Physics Today**, v. 63, n. 11, p. 27-32, Nov. 2010. 2 LAFOREST, M.; BAUGH, J.; LAFLAMME, R. Time-reversal formalism applied to maximal bipartite entanglement: theoretical and experimental exploration. **Physical Review A**, v. 73, n. 3, p. 032323-1-032323-9, Mar. 2006.

IC14

Crescimento e caracterização de pontos quânticos auto-organizados de InAs

LEMES, M. F. S. ; MAREGA, E.

matheus.lemes@usp.br

A busca por materiais semicondutores capazes de serem empregados em tecnologias quânticas têm motivado cientistas nas últimas décadas. Pontos quânticos (do inglês quantum dots - QD) únicos auto-organizados de InAs/GaAs, crescidos por epitaxia de feixes moleculares, são, atualmente, uma das abordagens mais promissoras, pois apresentam alta estabilidade, eficiência na emissão, fácil integração na eletrônica atual e produção de fótons únicos coerentes.(1) Contudo, para explorar a gama de possibilidades que essas nanoestruturas possuem, é necessário o desenvolvimento de técnicas capazes de determinar a localização precisa de QDs únicos na amostra. Esse trabalho teve objetivo identificar uma abordagem experimental capaz de determinar precisamente a posição espacial de classes únicas de QDs. Através da técnica de fotoluminescência de excitação não ressonante à baixa temperatura, conhecida como micro-fotoluminescência não ressonante, foi possível identificar linhas espectrais bem definidas. Essas linhas foram fitadas por uma distribuição lorentziana (2) e apresentam um alargamento de no máximo $200 \mu eV$, confirmando que representam pontos quânticos únicos. Por meio de um mapeamento espacial de uma pequena região da amostra, foi possível determinar a localização desses QDs. Além disso, foi possível observar que o pico de emissão se deslocou para baixas energias com o aumento da temperatura, visto que houve diminuição do band gap do InAs e do GaAs. Dessa forma, a técnica de micro-fotoluminescência promete ser uma importante ferramenta para a precisa localização e caracterização de QDs únicos, embora mais estudos precisem ser feitos para determinar em que situações ela seria melhor empregada.

Referências:

1 SPIENZA, L. *et al* . Combined atomic force microscopy and photoluminescence imaging to select single InAs/GaAs quantum dots for quantum photonics devices, **Scientific Reports** , v.7, n.6205,2017. DOI 10.1038/s41598-017-06566-5. 2 KASTNER, M. A. Artificial atoms. **Physics Today** ,v.46,n.1,p.24,1993. DOI 10.1063/1.881393.

IC15

Avaliação da resposta da terapia fotodinâmica em modelos 3D de tumor de mama empregando a espectroscopia Raman

MARQUES, M. J. D. A. M. ; KURACHI, C. ; CAMPOS, C. D. P. ; IERMAK, I.

maria.julia.marques@usp.br

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica que associa luz, oxigênio molecular e agentes fotossensibilizadores e gera um efeito citotóxico na célula alvo.(1) Os compostos fotossensíveis são excitados pela luz em comprimento de onda adequado e reagem com o oxigênio molecular formando oxigênio singlete que irá induzir a morte celular. Devido à sua seletividade, a TFD é uma técnica que, na prática clínica, possui poucos ou nenhum efeito colateral. O objetivo deste projeto é avaliar os efeitos da TFD em culturas tridimensionais (3D) de células tumorais utilizando a microespectroscopia Raman. A microscopia confocal Raman é um dos métodos mais adequados para a descoberta de mecanismos moleculares dos processos metabólicos, sendo possível o estudo de amostras de células vivas sem o uso de marcadores. As culturas 3D de células serão utilizadas como modelo de tumor in vitro e o protocolo de tratamento com TFD é proposto para não causar morte completa do tumor, permitindo a investigação de uma formação tumoral remanescente. O fotossensibilizador Photodithazine (PDZ) foi incubado por 24h e uma Biotable® foi usada como fonte de luz. Para analisar o tumor 3D, foi utilizado o microscópio confocal Raman Witec Alpha 300 RAS. A análise do tumor é feita antes e depois da TFD.

Referências:

1 ISSA, M.C. A.; MANELA-AZULAY, M. Terapia fotodinâmica: revisão da literatura e documentação iconográfica. **Anais Brasileiro de Dermatologia** ,v.85, n.4,p. 501-511,2010.

IC16

Resolvendo charadas cripto-aritméticas com algoritmos cooperativos

REIS, L. A. ; FONTANARI, J. F.

lucas.antunes.reis@usp.br

A compreensão dos fatores que influenciam o desempenho de grupos de trabalho é crucial para a economia dos países desenvolvidos, cuja força de trabalho é formada majoritariamente por pessoas que "resolvem" problemas. Neste projeto, vamos estudar o desempenho de dois algoritmos que envolvem a colaboração (troca de informações) entre agentes que exploram o espaço de soluções de charadas cripto-aritméticas: algoritmo genético (1) e algoritmo cultural. (2) O desempenho de um algoritmo será medido pelo tempo que o grupo de agentes leva para encontrar a solução da charada. Além disso, vamos identificar as características das charadas que determinam sua dificuldade para cada um desses algoritmos de busca.

Referências:

1 GOLDBERG, D. E. **Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning** . Reading, MA: Addison-Wesley, 1989. 2 FONTANARI, J. F. Imitative learning as a connector of collective brains. **PLoS ONE** , v. 9, p. e110517, 2014. DOI: 10.1371/journal.pone.0110517.

IC17

Mapeamento de funções metabólicas em células de câncer e saudáveis: Estudo da concentração e fração livre de NADH, taxa redox e co-localização de mitocôndrias

SOUZA, G. ; ROMANO, R. ; KURACHI, C.

giancarlo.souza@usp.br

A atividade mitocondrial em células eucarióticas é uma das principais fontes de obtenção de energia e são, portanto, essenciais para manutenção e proliferação celular. Anomalias nos processos mitocondriais estão ligadas à diversas doenças neurodegenerativas e ao câncer. Deste modo, o monitoramento do metabolismo celular pode ser utilizado para investigar e identificar diferenças metabólicas entre células saudáveis ou alteradas. (1) Algumas biomoléculas possuem papel importante nesses processos metabólicos celulares e podem ser utilizadas para monitorá-los. Dois dos principais marcadores do metabolismo celular são o NADH (Reduced Nicotinamide Adenine Dinucleotide) e FAD (Flavin Adenine Dinucleotide), carreadores de elétrons durante o processo de respiração celular. (2) Um parâmetro relevante para estimar o estado de oxido-redução e quantidade de oxigênio molecular da célula é a taxa redox óptica, que pode ser obtida através da comparação da emissão de fluorescência do NADH e do FAD. (3) O estudo da fluorescência estacionária e dinâmica dessas coenzimas intrinsecamente fluorescentes é de alta importância para que se possa entender os mecanismos metabólicos que diferenciam células saudáveis ou de lesões. A partir dessa premissa, este trabalho tem como principal objetivo o estudo de diferentes tipos celulares por meio da autofluorescência das moléculas de NADH e FAD, de modo a mapear as funções metabólicas e buscar padrões de características em tipos celulares semelhantes. A fim de comparação e melhor entendimento sobre a interferência do microambiente das moléculas de NADH, foram realizadas medidas de fluorescência estacionária e resolvida no tempo de soluções dos fluoróforos em água destilada e etanol. Medidas autofluorescência utilizando de microscopia confocal com excitação por dois fótons foram realizadas em células saudáveis de fibroblastos dérmicos humanos neonatais, em células de carcinoma espinocelular de língua humana e de melanoma murino pigmentado e não pigmentado. A taxa redox óptica (TRO) foi calculada para cada tipo celular. Foi possível demonstrar uma diferença significativa de taxa redox óptica entre todos os tipos celulares, com maior redução (53,1%) da TRO das células de melanoma, quando comparadas com as células saudáveis. Além disso, uma tendência de diminuição da taxa redox óptica foi observada em função da alta demanda metabólica dos diferentes tipos celulares. Análises de FLIM para os mesmo tipos celulares mostrou ser possível encontrar diferença no sinal de tempo de vida de fluorescência suficiente para uma diferenciação celular baseada no metabolismo.

Referências:

- LIU, Z. *et al* . Mapping metabolic changes by noninvasive, multiparametric, high-resolution imaging using endogenous contrast. **Science Advances** , v. 4, n. 3, p. eaap9302, 2018.
- YU, Q.; HEIKAL, A. A. Two-photon autofluorescence dynamics imaging reveals sensitivity of intracellular NADH concentration and conformation to cell physiology at the single-cell level. **Journal of Photochemistry and Photobiology B : biology**, v. 95, n.1, p.46–57, 2009.
- SKALA, M.; RAMANUJAM, N. Multiphoton redox ratio imaging for metabolic monitoring in vivo. **Methods in Molecular Biology** , v. 594, p. 155–162, 2010.

IC18

Um estudo sobre algoritmos quânticos para a solução de equações diferenciais

SENA, V.

vitor_lucasena@usp.br

Desde a década de 1990, com o advento da Computação Quântica, os algoritmos quânticos têm se mostrado cada vez mais aplicáveis à solução de problemas reais. Trabalhos recentes (1-2) propuseram algoritmos quânticos para encontrar soluções de equações diferenciais inspirados em já existentes métodos que buscam solucionar sistemas lineares (3), ambos com eficiência superior aos algoritmos clássicos para as mesmas tarefas. Nosso trabalho visa analisar e discutir estes algoritmos a fim de apresentar o poder que a Computação Quântica já possui em resolver problemas cotidianos. Fizemos uma análise detalhada acerca dos algoritmos quânticos propostos em (1-3), entendendo e reproduzindo os resultados teóricos lá obtidos. As técnicas matemáticas utilizadas foram: álgebra de operadores e vetores de estado no contexto de Mecânica Quântica e análise da ordem de eficiência dos respectivos algoritmos. Além disso, estudamos o sistema físico apresentado em (2) que visa implementar um algoritmo para solucionar equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. De fato, os algoritmos quânticos que estudamos efetivamente apresentam um ganho de eficiência sobre os seus pares clássicos para as mesmas tarefas. Em especial, ambos (1-2) são bastante factíveis experimentalmente, dado que a construção teórica deles envolve operações cuja identificação física é imediata. Apesar disso, não há grandes distinções estruturais na maneira como o algoritmo quântico é elaborado, ao passo que, assim como no caso clássico, o problema a ser resolvido é o de inverter uma matriz quadrada. Assim sendo, ainda que seja indiscutível o ganho de eficiência que estes algoritmos quânticos apresentados para solução de equações diferenciais têm sobre àqueles clássicos, acreditamos que a Computação Quântica ainda não fora utilizada em todo seu potencial para atacar este problema, uma vez que a elaboração da solução do problema em si segue um algoritmo muito próximo àquele feito no caso clássico.

Referências:

1 ARRAZOLA, J. M. *et al* . Quantum algorithm for nonhomogeneous linear partial differential equations. **Physical Review A** , v. 100, n. 3, p. 032306, 2019. 2 XIN, T. *et al* . Quantum algorithm for solving linear differential equations: theory and experiment. **Physical Review A** , v. 101, n. 3, p. 032307, 2020. 3 CHILDS, A. M. *et al* . Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision. **SIAM Journal on Computing** , v. 46, n. 6, p. 1920–1950, 2017.

IC19

Influência da força iônica em interações de interface entre septinas parceiras

FACIOLI, M. ; ARAÚJO, A. P. U. D.

marialaurafacioli@usp.br

Septinas são proteínas classificadas junto as P-loop GTPases e fazem parte do citoesqueleto. Foram descritas pela primeira vez como proteínas envolvidas na citocinese em leveduras, mas atuam também na formação de barreiras de difusão, na compartimentalização, na migração e rigidez da membrana celular, na apoptose, entre outras funções. Para exercer essas funções, as septinas interagem entre si formando heterocomplexos que se polimerizam em filamentos. Em humanos, há 13 septinas que atuam em combinações de três ou quatro subunidades para formar filamentos. Nosso modelo de estudo escolhido foi de um complexo parcial, envolvendo apenas duas subunidades de septinas humanas: SEPT7 e SEPT3, na tentativa de compreender o mecanismo de oligomerização dessas septinas em função da força iônica. Uma vez que SEPT3 e SEPT9 podem, em teoria, se substituir mutuamente na organização do oligômero, os resultados obtidos foram comparados com os de Brognara (1), que realizou uma análise similar com o complexo SEPT7-SEPT9. Assim, construções de SEPT3, SEPT7 e do complexo SEPT3-7 foram produzidos em *E. coli*, purificados e avaliados com relação aos estados oligoméricos em tampão com 300 mM de NaCl (alto sal) e com 40 mM de NaCl (baixo sal). As amostras purificadas foram submetidas à cromatografia de exclusão molecular e a cromatografia de exclusão molecular acoplada a espalhamento a multi-ângulos (SEC-MALS) a alto e baixo sal para determinação das massas. Notou-se que para as proteínas separadas SEPT7 e SEPT3, a mudança da força iônica não influenciou significativamente seus estados oligoméricos. Entretanto, percebe-se que o heterocomplexo a alto sal mostrou a formação de dímeros, assim como ocorreu no complexo SEPT7-9. Porém, a baixo sal, enquanto o complexo com SEPT7-9 apresentava-se como um tetrâmero, o complexo SEPT3-7 mostrou monômeros, heterodímeros e um provável tetrâmero. A interface SEPT3-7 foi mais sensível ao aumento de sal e, mesmo em condições de baixo sal, o tetrâmero não foi estável. Assim, concluímos que é possível que a SEPT3 substitua a SEPT9, mas provavelmente o complexo terá uma dinâmica diferente em cada caso.

Referências:

BROGNARA, G. **Caracterização estrutural e biofísica da septina 7 humana e de seus complexos com as septinas 3 e 9**. 2019. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

IC20

Interação de troca entre íons de cério decorrente da hibridização com elétrons de condução

LÍBERO, V. L. ; PICOLI, F. D.

felipepicoli@usp.br

Neste trabalho revisitamos o formalismo de Coqblin-Schrieffer (1) usado para obter a energia de interação efetiva do tipo RKKY entre dois estados localizados do tipo f , $l = 3$, decorrente da hibridização destes estados com os elétrons de condução. Nosso procedimento não se restringe ao limite assintótico, $R \rightarrow \infty$, como é costumeiramente realizado, mas estendemos os cálculos para quaisquer distâncias interatômicas. Corrigimos também a não hermeticidade do Hamiltoniano Efetivo da interação estabelecendo a simetria de troca do sistema. Tais cálculos impactam significativamente na contribuição das componentes do momento angular $j = 5/2$ para a energia efetiva de interação e conseqüentemente no ordenamento ferromagnético ou anti-ferromagnético em função da separação iônica. No limite de $R \rightarrow \infty$, recuperamos os conhecidos resultados mostrados em (1-2), os quais apenas as componentes de $m = \pm 1/2$ contribuem significativamente; entretanto no limite oposto outras componentes se fazem mais importantes: $m = \pm 3/2$, para distâncias intermediárias, e $m = \pm 5/2$, para distâncias extremamente curtas, as quais os íons ordenam-se exclusivamente de forma ferromagnética.

Referências:

1 COQBLIN, B.; SCHRIEFFER, J. R. Exchange interaction in alloys with cerium impurities. **Physical Review** , v. 185, n. 2, p. 847-853, 1969. 2 SIEMANN, R.; COOPER, B. R. Planar coupling mechanism explaining anomalous magnetic structures in cerium and actinide intermetallics. **Physical Review Letters** , v. 44, n. 15, p. 1015-1019, 1980.

IC21

Busca por matéria escura no Centro Galáctico com o Telescópio Espacial de Raios Gama Fermi

OTTO, M. P. ; VIANA, A.

mateus.potto@usp.br

É geralmente aceito na atualidade que a densidade de matéria do Universo consiste principalmente numa componente desconhecida, denominada Matéria Escura (ME). Em ambientes de alta densidade do Universo, ME pode se auto-aniquilar e produzir um sinal intenso de raios gama. Entre os possíveis alvos, a região do Centro Galáctico é esperada como a fonte mais brilhante de aniquilações de ME no céu em raios gama. Este projeto almeja estudar e caracterizar a emissão de raios gama da região do Centro Galáctico como vista pelo *Fermi Large Area Telescope (Fermi-LAT)* à bordo do Telescópio Espacial de Raios Gama Fermi. Nosso objetivo é recuperar o famoso resíduo do *GeV Excess* no Centro Galáctico (1) e interpretá-lo em termos de um sinal de auto-aniquilação de matéria escura.

Referências:

1 ACKERMANN, M. *et al* . The Fermi Galactic Center GeV excess and implications for dark matter. *Astrophysical Journal* , v. 840, n. 1, p. 43-1-43-34, May 2017.

IC22

Origem de íntrons spliceossomais: vestígios no genoma de um excavata

REIS, R. D. ; MARCO, R. D.

renandosreiss@usp.br

Íntrons spliceossomais são sequências de DNA que interrompem genes de proteínas em eucariotos e são removidos do mRNA por uma complexa maquinaria molecular chamada de spliceossomo. Eles são um entre vários tipos de íntrons que se estendem por todos os seres vivos e sua origem remonta ao evento de endossimbiose que criou os eucariotos. (1) Muito do que se sabe sobre esses íntrons, como sítios de ligação e mecanismo de exclusão do mRNA, foi produzido por pesquisas em plantas, fungos e animais. No entanto, questões sobre sua origem, suas estruturas mais fundamentais e seu papel na história da evolução dos genomas eucariotos permanecem com respostas desconhecidas. O presente projeto busca estudar íntrons spliceossomais da espécie *Naegleria gruberi*, um protista do reino *Excavata*, como ponto inicial de um estudo genômico comparativo entre íntrons de eucariotos inferiores e íntrons de grupo II, a fim de preencher lacunas de conhecimento nessa área de estudo. A espécie, unicelular de vida-livre, possui um genoma compacto com genes compondo 58% do genoma e com íntrons muito pequenos, mais de 60% com tamanhos entre 40 e 100 pbs. (2) Foram realizadas análises estatísticas e computacionais nas sequências intrônicas, entre elas uma análise de conteúdo de informação na sequência de bases e análise de WebLogo. Foram identificadas estruturas nas pontas 5' e 3' dos íntrons bem conservadas e baixo nível de informação na região central do íntron, enquadrando-se no estereótipo de íntrons do tipo U2 encontrados em plantas, animais e fungos. (3) No entanto, notou-se a ausência de uma longa cauda de polipirimidina, tradicionalmente importante para o mecanismo de splicing. Esses resultados parciais em conjunto com a literatura científica apontam para a existência de sítios de splicing bem demarcados já no último ancestral comum dos eucariotos (1), mas também levanta perguntas importantes sobre a função e a presença ancestral da cauda de polipirimidina nos íntrons spliceossomais.

Referências:

1 KOONIN, E. V.; CSUROS, M.; ROGOZIN, I. B. Whence genes in pieces: reconstruction of the exon-intron gene structures of the last eukaryotic common ancestor and other ancestral eukaryotes. **Wiley Interdisciplinary Reviews** : RNA, v. 4, n. 1, p. 93-105, 2013. 2 FRITZ-LAYLIN, L. K. *et al* . The genome of *Naegleria gruberi* illuminates early eukaryotic versatility. **Cell** , v. 140, n. 5, p. 631-642, 2010. 3 HERTEL, K. J. (ed.) **Spliceosomal pre-mRNA splicing** . Totowa, NJ: Humana Press, 2014. (Methods in Molecular Biology, v. 1126).

IC23

Propriedades eletrônicas de semicondutores a partir do estudo das simetrias dos grupos cristalinos.

SALOMON, B. L. R. ; SIPAHI, G. M.

blrs2000@hotmail.com

O Laboratório de Física Computacional desenvolve programas para realizar o cálculo de estruturas eletrônicas de semicondutores. Como os semicondutores geralmente são sólidos cristalinos, é preciso estudar as estruturas dos cristais e suas simetrias. Tendo isso em mente, o projeto visa desenvolver um programa com o intuito de gerar os cálculos que possam facilitar a análise dessas estruturas. Neste período iniciei a confecção de um código computacional para determinar a primeira zona de Brillouin de uma rede, discretizar e operar as transformações de simetria no conjunto de pontos. O programa é em Fortran 90 e a primeira parte é uma versão modificada do código em Javascript extraído da página Drawing Brillouin zones. (1)

Referências:

1 TECHNISCHE UNIVERSITÄT GRAZ. **Drawing brillouin zones** . Disponível em: http://lampx.tugraz.at/~hadley/ss1/bzones/drawing_BZ.php Acesso em: 30 set. 2020.

IC24

Adaptação da detecção e programação para técnica de retroespalhamento de luz coerente.

RAMOS, I. ; BONI, L. D.

isabela.ramos.almeida@usp.br

Este trabalho tem como foco principal a montagem e o estudo da técnica de retroespalhamento de luz coerente para fins de ser aplicada em estudos no Grupo de Fotônica do IFSC-USP. Essa técnica baseia-se na análise da luz coerente retroespalhada por um material qualquer. Essa luz espalhada fornece informações importantes sobre o material, como, por exemplo, o livre caminho médio entre centros espalhadores que compõem.(1) O estudo foi concentrado em entender o funcionamento da técnica e analisar o comportamento do retroespalhamento de luz coerente por distintas distribuições de centros espalhadores. Dependendo do padrão do retroespalhamento projetado em um anteparo, é possível determinar o livre caminho médio entre esses espalhadores, o que é uma informação importante para se usar em várias aplicações e estudos, como, por exemplo, lasers aleatórios.(2) A técnica foi montada e se mostrou sensível as medidas, o cone de retroespalhamento se mostrou consistente com a teoria submetida indicando informações sobre o caminho que a luz percorreu dentro da amostra, demonstrando que depende estritamente da distribuição e concentração das partículas dentro dela.

Referências:

1 COREY, P. R.; KISSNER, M. Coherent backscattering of light. **American Journal Physics** , v.63, n.6,p.560,1995. 2 SUN, T. *et al* . Dy-namics of random laser and coherent backscattering of light from ZnOamplifying random medium. **Applied Physics Letters** , v. 91,n.24, p.241110–241110,2007.

IC25

Investigando as concepções conceituais em conteúdos de Mecânica de alunos de graduação

SILVA, A. C. ; MUNIZ, S. ; PAIVA, F. F.

angelica.carrillo.silva@usp.br

O FCI (Force Concept Inventory) (1) destina-se a analisar as concepções da Mecânica Newtoniana de alunos do Ensino Básico e Superior por meio de questões de múltipla escolha, elaboradas de maneira a confrontá-los com os ideais do senso comum de fenômenos físicos do cotidiano. Por vezes, o FCI foi aplicado por professores e pesquisadores preocupados com o aprendizado conceitual dos estudantes, podendo ser utilizado com diferentes finalidades, sendo elas Diagnóstica, Avaliativa e de Colocação. O presente trabalho apresenta o resultado da aplicação do FCI para alunos matriculados nas disciplinas de Física Básica dos cursos de Bacharelado em Física, Bacharelado e Licenciatura em Matemática e Engenharias do campus de São Carlos da USP. Com o intuito de quantificar o ganho conceitual em Mecânica dos estudantes a partir das mudanças metodológicas nas disciplinas oferecidas a partir de 2017, em que metodologias de ensino ativas passaram a ser utilizadas em turmas integradas com alunos dos mais diferentes cursos, duas aplicações do questionário foram feitas, ao início (Pré-Teste) e ao fim (Pós-Teste) do primeiro semestre letivo dos anos de 2017 (2), 2018 e 2019. Participaram do estudo um total de 1167 alunos. Utilizando-nos de análises estatísticas, estudamos os resultados dentro das diferentes turmas e cursos de ingresso, comparando-os com os dados internacionais (3) da aplicação do FCI. Pudemos confirmar que turmas envolvidas com metodologias ativas apresentam maior ganho conceitual ao fim do curso, o que está de acordo com a literatura recente. Assim, o presente trabalho contribui para a literatura nacional verificando, em larga escala, que a mudança para metodologias de aprendizagem ativa influencia de maneira positiva o aprendizado conceitual dos alunos. Perspectivas futuras incluem a avaliação da real eficiência do mecanismo de avaliação empregado atualmente na Universidade, a partir da avaliação da correlação entre ganho conceitual e média final dos alunos.

Referências:

1 HESTENES, D.; WELLS, M.; SWACKHAMER, G. Force concept inventory. **Physics Teacher** , v. 30, n. 3, p. 141-158, 1992. 2 QUIBAO, M. *et al.* Investigando a compreensão conceitual em física de alunos de graduação em cursos de ciências, engenharias e matemática. **Revista Brasileira de Ensino de Física** , v. 41, n. 2, p. e20180258-1-e20180258-10, 2019. 3 ARTAMONOVA, I.; MOSQUERA, J. C.; ARTAMANOV, J. D. M. Aplicación de force concept inventory en América Latina para la evaluación de la comprensión de los conceptos básicos de mecánica a nivel universitario. **Revista Educación en Ingeniería** , v. 12, n. 23, p. 56-63, 2017.

IC26

Tipagem molecular de bactérias gram-negativas carreando o gene blaKPC por eletroforese em gel com campos pulsados

RIOS, A. L. V. ; BORALLI, C. M. D. S. ; CAMARGO, I.

analvrios@gmail.com

Desde a descoberta dos antibióticos, a resistência bacteriana tem sido um problema de saúde pública e estima-se que até 2050 o número de mortes causadas pela resistência bacteriana pode chegar a 10 milhões por ano. As carbapenemases do tipo KPC (*Klebsiella pneumoniae carbapenemase*) são um dos tipos de mecanismo de resistência aos carbapenêmicos, antibióticos utilizados como alternativas de última escolha para tratamento de infecções, por bactérias da ordem Enterobacterales. (1) A mobilidade e difusão do gene blaKPC é atribuída aos plasmídeos transferíveis e a uma grande diversidade de elementos genéticos moveis, como o *Tn4401*. (2) Atualmente, as KPCs são produzidas por diversas bactérias gram-negativas que estão espalhadas por todo o mundo e sua epidemiologia varia de acordo com a localização geográfica. (3) Portanto, devido à importância em saber como se dá a disseminação da resistência bacteriana em bactérias gram-negativas resistentes aos carbapenêmicos, este projeto de iniciação científica teve como objetivo fazer tipagem de bactérias gram-negativas contendo o gene blaKPC-2 para verificação de possível disseminação clonal em um hospital de Manaus e outro de Belo Horizonte. Para isso, as 44 amostras bacterianas foram submetidas à macrorrestrição do DNA seguida por eletroforese em gel com campo pulsado (PFGE). Conseguimos concluir os experimentos com as amostras de *K. pneumoniae*, *E. coli* e as pertencentes ao gênero *Enterobacter* e obtivemos uma padronização de um protocolo adequado para realização do PFGE com amostras de *Serratia marcescens*. As imagens obtidas das amostras de *K. pneumoniae*, *E. coli* e as pertencentes ao gênero *Enterobacter* permitirão futuras análises pelo *software Bionumerics*. A padronização do protocolo de *Serratia marcescens* permitirá a obtenção de imagens que também serão utilizadas pelo *Bionumerics*. Precisamos obter a padronização de um protocolo de PFGE para *Providencia stuartii* e identificar as espécies de algumas bactérias pelo sequenciamento do gene rRNA 16S para que seja possível a tipagem por molecular por PFGE. Posterior análise dos padrões de banda gerados por PFGE pelo *Bionumerics* permitirá classificar as linhagens em indistinguíveis, intimamente relacionadas, possivelmente relacionadas ou diferentes. Linhagens indistinguíveis e intimamente relacionadas sugerem ocorrência de disseminação da resistência de maneira clonal.

Referências:

1 ANDRADE, L.; DARINI, A. Bacilos gram- negativos produtores de beta-lactamases: que bla bla bla é esse? **Journal of Infection Control** , v. 6, n. 1, p. 16–25, 2017. 2 PARTRIDGE, S. R. *et al* . Mobile genetic elements associated with antimicrobial resistance. **Clinical Microbiology Reviews** , v. 31, n. 4, p. 1–61, 2018. 3 MUNOZ-PRICE, L. S. *et al* . Clinical epidemiology of the global expansion of *Klebsiella pneumoniae carbapenemases*. **Lancet Infectious Diseases** , v. 13, n. 9, p. 785– 796, 2013

IC27

Fabricação de arcabouços 3D para o crescimento de filmes bacterianos

MORAES, J. Q. R. ; OTUKA, A. J. G.

jonathasqrm@gmail.com

Em 1931, Maria Göppert-Mayer descreveu em sua tese de doutorado a primeira proposta teórica sobre a existência da absorção de dois fótons (A2F) (1), um processo óptico não linear, no qual campos elétricos de alta intensidade podem provocar efeitos nas ligações interatômicas da matéria. Esse é o princípio físico pelo qual podemos promover a fotopolimerização via absorção de dois fótons (PA2F), na qual uma molécula fotoiniciadora, após ser irradiada por um feixe laser de alta intensidade, sofre uma quebra e gera radicais livres, que permitem a polimerização de, por exemplo, monômeros acrílicos de grande interesse tecnológico. (2) Auxiliados por essa técnica, podemos criar dispositivos em escala micrométrica de forma versátil e direta, com alta resolução espacial. Nesse trabalho, utilizamos um laser Ti:safira, centrado em 780 nm, com largura de banda 50 nm, taxa de repetição de 86 MHz e pulsos de 100 fs para fabricar estruturas poliméricas com geometria tridimensional e de potencial aplicabilidade em sistemas biológicos. Tais estruturas foram submetidas a testes de biocompatibilidade com bactérias da espécie *Komagataeibacter xylinus*, que se desenvolvem consumindo uma solução a base de glicose, e posteriormente produzem uma matriz porosa de biocelulose, com nanofios tridimensionais, flexíveis e de grande versatilidade. (3) Esses testes permitiram conhecer melhor o comportamento (desenvolvimento e mobilidade) dessas bactérias, bem como caracterizar os filmes biológicos por elas produzidos, permitindo, por exemplo, a sua utilização em experimentos de microfabricação, utilizando o biopolímero como substrato flexível em diferentes aplicações de óptica, fotônica e biomedicina.

Referências:

1 GÖPPERT-MAYER, M. Über elementarakte mit zwei Quantensprüngen. *Annalen der Physik*, v. 401, n. 3, p. 273-294, 1931. 2 OTUKA, A. J. G. **Estruturas poliméricas com nanotubos de carbono: processamento a laser, caracterização e aplicações**. 2016. 108 f. Tese (Doutorado em Ciência e Engenharia de Materiais) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016. 3 ULLAH, H.; SANTOS, H. A.; KHAN, T. Applications of bacterial cellulose in food, cosmetics and drug delivery. *Cellulose*, v. 23, n. 4, p. 2291-2314, 2016.

IC28

Desenvolvimento de nanotubos de TiO₂ com diferentes geometrias aplicados na fotossíntese artificial

SANTOS, A. M. ; GONÇALVES, R.

anasanches@estudante.ufscar.br

O uso do hidrogênio apresenta-se como uma ótima alternativa de fonte de energia renovável, pois quando produzido através da fotossíntese artificial, só utiliza-se água e luz, e um fotocatalisador na sua reação, e só é liberado oxigênio. Nesse contexto, o óxido de titânio (TiO₂) serve como um excelente fotocatalisador, pois possui elevada estabilidade em meio aquoso, energia de band gap de aproximadamente 3.0 eV, estrutura de bandas adequadas para separar a molécula da água e possui grande capacidade de armazenar energia. (1) Além de ter baixo custo e toxicidade, ser abundante na natureza e sua geometria ser mais eficiente na reação de dissociação da água. Esta pesquisa teve como objetivos o desenvolvimento de nanotubos de TiO₂ com diferentes tamanhos e diâmetros pelo método de anodização e, estudo da influência que a geometria dos nanotubos têm na geração de hidrogênio pela fotossíntese artificial. Para tal, placas de Ti metálico (99.6%) foram anodizadas em uma solução eletrolítica contendo etileno glicol, H₂O (4,0% em volume) e NH₄F (0,25% em massa), aplicando um potencial elétrico de 60 V em intervalos de tempo entre 5 e 90 minutos (A5, A10, A15, A30, A60, A90). Após a anodização, as amostras passaram por tratamento térmico a 450°C. As reações de fotossíntese foram realizadas utilizando-se um potenciostato/galvanostato, uma célula eletroquímica de três eletrodos, um simulador solar classe A como fonte de luz, e uma solução aquosa 0,5 M de Na₂SO₄ como eletrólito da reação. Foi realizado DRX para todas as amostras e observou-se que todas apresentaram picos correspondentes ao TiO₂ na fase anatase, que possui maior atividade fotocatalítica, e ao substrato de titânio, já que as amostras sofreram tratamento térmico abaixo da temperatura de formação da fase rutilo. Também foi realizado o MEV das amostras e notou-se que o tempo de anodização é diretamente proporcional ao comprimento dos tubos e inversamente proporcional ao diâmetro das paredes. Além de ser proporcional à formação de camadas nanoporosas no topo e granulações nas paredes dos tubos. O PEC das amostras evidenciou que a amostra com maior densidade de corrente e maior transferência de carga, foi a A60, com corrente de 0,17 mA, isto indica que o maior comprimento do tubo e a menor espessura de sua parede melhoram a transferência de carga do material. Através dos gráficos de EIS realizados no claro e no escuro, observou-se que todas as amostras apresentaram grande resistência à transferência de carga tanto no escuro como no claro, com diagramas de impedância caracterizados por um semicírculo de alta frequência e um arco de baixa frequência, e espectros de impedância com características similares. A amostra com melhor resultado foi a A60 pois apresenta maior comprimento e menor espessura dos tubos, sendo menos frágil e com menos camadas nanoporosas no topo, além de também apresentar granulações nas bases do tubo e picos mais distintos da fase anatase. Essas características melhoram a eficiência da amostra como fotocatalisador na quebra da água, o que é confirmado pela maior densidade de corrente desta em relação às demais amostras.

Referências:

1 ROY, P.; BERGER, S.; SCHMUK, P. TiO₂ nanotubes: synthesis and applications. **Angewandte Chemie International Edition** , v. 50, n. 13, p. 2904-2939, 2011.

IC29

Produção heteróloga e caracterização das xilanases da família GH10 e aplicações na degradação de xilano e produção de xilooligossacarídeos

VACILOTTO, M. M. ; POLIKARPOV, I.

milenamvacilotto@usp.br

Xilanases são um grupo de enzimas que atuam preferencialmente no xilano, um polissacarídeo de xilose presente na fração hemicelulósica da biomassa. Esta, por sua vez, é um dos recursos orgânicos mais abundantes da Terra, e representa uma fonte promissora para a produção de biocombustíveis e outros produtos de valor agregado. Essas hemicelulases possuem vastas aplicações biotecnológicas e são usadas para a produção de bioetanol, branqueamento de polpas, aditivos de alimentos, produção de xilooligossacarídeos e aditivos em ração animal. A hidrólise enzimática é altamente explorada a nível industrial, pois representa uma técnica limpa e precisa, uma vez que os produtos da reação podem ser selecionados de acordo com o padrão de clivagem da enzima e não há a produção de produtos indesejados. (1-2) No presente estudo, apresentamos a caracterização bioquímica de duas glicosil hidrolases da família GH10 e potenciais aplicações na produção de xilooligossacarídeos a partir de heteroxilanos. Os genes codificantes das xilanases dos organismos *Paludibacter propionigenes* (PpXyn10) e *Jonesia denitrificans* (JdXyn10) foram clonados e expressos com sucesso em sistema heterólogo usando a cepa *E. coli* ArcticExpress. A caracterização bioquímica revelou que a PpXyn10 apresenta maior atividade entre os pHs entre 5 e 7 e a 35° C, enquanto que a JdXyn10 é mais estável em pHs entre 6 a 8 e a 50° C. Nas condições ótimas de pH e temperatura, a PpXyn10 manteve cerca de 20% de sua atividade inicial por 7 dias, enquanto que a JdXyn10 desnaturou em menos de 10 horas. O painel de substratos revelou que as xilanases alvos do estudo não são capazes de hidrolisar cadeias formadas por resíduos de glicose, e suas atividades específicas são maiores em xilano do que em arabinoxilano. As enzimas também mostraram tolerância de moderada a alta em relação a etanol e NaCl, apresentando acima de 40 % da atividade inicial em soluções com 20 % de cloreto de sódio; já na presença de 10 % de etanol, a atividade da PpXyn10 foi pouco afetada enquanto a da JdXyn10 caiu para 60 %. Quando testadas em heteroxilanos, apresentaram xilobiose (X2) e xilotriose (X3) como produtos hidrolíticos preferencias, liberando xilose (X1) apenas após longas horas de reação. Por fim, obtiveram rendimentos totais de XOS produzidos a partir de xilano de beechwood e rye arabinoxilano superiores a 40 % e 20 %, respectivamente. Ambas as xilanases se mostraram promissoras para aplicações em processos industriais que envolvem altas quantidades de sal e etanol, como as indústrias alimentícia e de bebidas alcoólicas, além apresentarem grande potencial para a produção de xilooligossacarídeos, conhecidos por sua atividade pré-biótica. (2-3)

Referências:

1 EVANGELISTA, D. E. *et al.* Biochemical characterization and low-resolution SAXS shape of a novel GH11 exo-1,4-xylanase identified in a microbial consortium. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 103, n. 19, p. 8035-8049, Oct. 2019. 2 SEPULCHRO, A. G. V. *et al.* Transformation of xylan into value-added biocommodities using *Thermobacillus composti* GH10 xylanase. **Carbohydrate Polymers**, v. 247, p. 116714-1-116714-14, Nov. 2020. 3 AMORIM, C. *et al.* From lignocellulosic residues to market: Production and commercial potential of xylooligosaccharides. **Biotechnology Advances**, v. 37, n. 7, p. 107397-1-107397-10, Nov. 2019.

IC30

Métodos para aprimorar as propriedades pseudo-aleatórias de mapas caóticos

ALVARENGA, J. P. D. V. ; MACHICAO, J. ; BRUNO, O. M.

j.p.valle@df.ufscar.br

A teoria do caos tem impactado diversas áreas do conhecimento, dentre elas está a criptografia. No qual a base das criptografias modernas são dependentes de bons geradores de números pseudo-aleatórios (PRNGs, da sigla em inglês), visto que são capazes de gerar números aparentemente aleatórios de forma determinística, o que é essencial nos algoritmos criptográficos. Visando o uso de mapas caóticos como PRNGs, utilizou de métodos capazes de transformar as órbitas destes mapas em sequências de números mais próximos das características aleatória. Para isso, aplicou-se métodos encontrados na literatura, como o deep-zoom (1) e skipping (2), e propôs novos métodos, tais como a variação do skipping, o skipping caótico, o método de rotação e o método de composição de mapas caóticos, em que todos os métodos foram aplicados nos mapa de tenda e mapa logístico. Para classificação dos métodos, utilizou de baterias de testes estatísticos, como NIST e DIEHARD, no qual os métodos deep-zoom e de rotação apresentaram excelentes resultados em ambos os teste (NIST e DIEHARD). Em especial, para o caso da composição do mapa logístico e mapa de tenda apresentou um elevado expoente de Lyapunov para uma variedade de parâmetros de controle do que os mapas isolados. Portanto, o uso dos métodos em mapas caóticos geram PRNGs capazes de impactar a criptografia.

Referências:

1 MACHICAO, J.; BRUNO, O. M. Improving the pseudo-randomness properties of chaotic maps using deep-zoom. **Chaos** :an interdisciplinary journal of nonlinear science, v.27, n.5, p.053116, 2017. 2 DE MICCO, L.; LARRONDO, H.A.; GONZALES, L.M.; MARTIN, M.T.; PLASTINO, A.; ROSSO, O.A. Randomizing nonlinear maps via symbolic dynamics. **Physica A** , v.387, n.14, p.3373-3383, 2008.

IC31

Nanopartículas luminescentes por conversão ascendente de energia para aplicações em teranóstica

BRAMBILLA, G. ; ARAI, M. ; MERIZIO, L. ; CAMARGO, A. D.

gabrielgvb1998@gmail.com

Nanopartículas luminescentes por conversão ascendente de energia (UCNPs) são materiais que tem chamado bastante atenção devido a suas diversas áreas de aplicação, principalmente na teranóstica, imageamento biomédico e sensores e as suas vantagens quando comparadas a outros materiais luminescentes como os corantes orgânicos e *quantum dots*. (1) Este trabalho teve como objetivo a síntese, através dos métodos hidrotérmico, de coprecipitação e decomposição térmica, e caracterização espectroscópica e estrutural de UCNPs compostas de uma matriz inorgânica de $NaYF_4$ dopada com 20% Yb^{3+} , 2% Er^{3+} (% em mol) para aplicações em teranóstica e biossensores. Pelo uso dos métodos hidrotérmico e de coprecipitação foi possível obter o material somente na fase cúbica, que possui baixa luminescência para as aplicações desejadas. Já o método de decomposição térmica possibilitou a obtenção de UCNPs de fase hexagonal com ótima cristalinidade e intensidade de emissão, que então foram revestidas com camadas de matriz ($NaYF_4$) e de sílica mesoporosa, ($mSiO_2$) para melhorar ainda mais sua luminescência e potencializar sua aplicação em meios biológicos. (2) Embora o revestimento com $NaYF_4$ tenha melhorado muito as intensidades de emissão das UCNPs, o revestimento com $mSiO_2$ acabou suprimindo boa parte de sua luminescência, mesmo tendo ajudado na estabilidade das NPs em solução aquosa. Em relação à emissão, pode-se perceber que fontes de excitação com potência mais baixa favorecem emissões no verde, assim como o revestimento com uma camada de matriz. Amostras dopadas com 25% Yb^{3+} , 0,3% Tm^{3+} de fase hexagonal também foram preparadas visando emissões na região do azul, porém, devido a diversos fatores, como a diferença na concentração dos íons dopantes ideias para a máxima emissão de cada um (3), a intensidade destas não é tão alta quanto as emissões daquelas dopadas com Er^{3+} .

Referências:

1 WANG, M.; ABBINENI, G.; CLEVINGER, A.; MAO, C.; XU, S. Upconversion nanoparticles: synthesis, surface modification and biological applications. **Nanomedicine** : nanotechnology, biology and Medicine, v. 7, n. 6, p.710–729, 2011. 2 LI, C. *et al* . A facile fabrication of upconversion luminescent and mesoporous core-shell structured $-NaYF_4 : Yb^{3+}, Er^{3+} @ mSiO_2$ nanocomposite spheres for anti-cancer drug delivery and cell imaging. **Biomaterials Science**, v. 1, n. 2, p. 213, 2013. 3 WEN, S. *et al* . Advances in highly doped upconversion nanoparticles. **Nature Communications** , v. 9, p. 2415, 2018. DOI: 10.1038/s41467-018-04813-5. .

IC32

Uma introdução ao fluxo de Ricci em superfícies

TRINDADE, G. ; FERREIRA, C. H. G.

gabrieltrindade@usp.br

Sendo o primeiro problema resolvido dentre os sete problemas do milênio estabelecidos pelo Instituto Clay, a Conjectura de Poincaré foi provada pelo russo Grigori Perelman fazendo uso do Fluxo de Ricci, um fluxo geométrico introduzido por Richard Hamilton em 1981. Ele consiste em uma equação diferencial parabólica que deforma uma métrica riemanniana de uma maneira específica. Em dimensão dois, o fluxo permite uma nova prova para um teorema fundamental para a geometria, chamado Teorema da Uniformização. Sumariamente, ele afirma que uma superfície de Riemann simplesmente conexa é conformemente equivalente ao disco aberto unitário, ao plano complexo ou à esfera de Riemann. Contido nessa afirmação está o fato de que qualquer variedade bidimensional suave compacta e sem bordo admite uma métrica de curvatura constante. (1) O caso tridimensional exige um pouco mais de cuidado já que, nesse contexto, o fluxo de Ricci desenvolve singularidades em tempo finito, de maneira que é preciso realizar cirurgias na variedade para continuar a deformar a métrica. O fluxo de Ricci com cirurgias, como é chamado, conduziu Perelman a conseguir demonstrar a Conjectura de Poincaré, além de provar uma versão em dimensão três do Teorema da Uniformização, conhecida como Conjectura da Geometrização de Thurston. Resumidamente, ela garante a existência de uma única decomposição de qualquer 3-variedade suave orientável compacta sem bordo em componentes que admitem uma dentre as oito geometrias de Thurston.

Referências:

1 SHERIDAN, N. **Hamilton's Ricci flow** . 2006. 97 f. Thesis (Honours) - Department of Mathematics and Statistics, University of Melbourne, Melbourne, 2006.

IC33

Estudo do efeito de estímulos visuais em peixes elétricos de campo fraco *Gymnotus carapo*

BELLINI, B. S. ; PINTO, R. D. ; ALMEIDA, L. B. D.

beatriz.bellini@usp.br

Gymnotus carapo é uma espécie de peixe elétrico pulsador de campo fraco de hábitos noturnos amplamente difundida nas Américas Central e do Sul. Possui um órgão gerador de pulsos elétricos (que se propagam na água ao redor do animal) e um extenso sistema sensorial elétrico espalhado pelo corpo, ambos integrados a seu sistema nervoso, constituindo um “sentido elétrico”. Dessa forma, eles são capazes de “enxergar” uma imagem elétrica de seus arredores e estabelecer um tipo de comunicação elétrica com seus coespecíficos, dois procedimentos chamados de eletrolocalização e eletrocomunicação, respectivamente. (1-2) Existem muitos trabalhos desenvolvidos sobre o sentido elétrico destes animais, mas pouco se sabe sobre suas outras modalidades sensoriais. Tem-se conhecimento de que são muito sensíveis a qualquer tipo de estímulo, reagindo imediatamente com acelerações transientes dos pulsos de seu órgão elétrico, o que é chamado de *Novelty Response* (NR). (3) Assim, pretendemos utilizar a NR como ferramenta para estudar a sensibilidade do sistema visual da espécie à cor e à intensidade de um estímulo luminoso. Para isso, foi construído um aparato experimental que possui basicamente as seguintes funções: geração de estímulos luminosos (simples, pulsados em *bursts* ou contínuos) com LEDs de alta potência e captação, condicionamento e aquisição de dados para o registro do tempo e da intensidade dos pulsos luminosos e dos pulsos elétricos emitidos pelo peixe enquanto este se movimenta livremente em um aquário. Dessa forma, será possível observar a ocorrência de NR e sua relação de causalidade com cada estímulo e, a partir disso, inferir se a luminosidade foi percebida pelo animal.

Referências:

1 VON DER EMDE, G. Active electrolocation of objects in weakly electric fish. **Journal of Experimental Biology** , v. 202, n. 10, p. 1205-1215, 1999. 2 LAREO, A.; FORLIM, C. .G; PINTO, R. D.; VARONA, P. Temporal code-driven stimulation: definition and application to electric fish signaling. **Frontiers in Neuroinformatics** , v. 10, 2016. DOI: 10.3389/fninf.2016.00041. 3 CAPUTI, A. A.; AGUILERA, P. A.; CASTELLÓ, M.E. Probability and amplitude of novelty responses as a function of the change in contrast of the reafferent image in *G. Carapo*. **Journal of Experimental Biology** , v. 206, n. 6, p. 999-1010, 2002.

IC34

Caracterizações espectroscópicas de uma nova classe de derivados de Corróis

AKIYAMA, J. ; GALINDO, D. M. ; BONI, L. D.

julia.akiyama@usp.br

O foco principal foi o estudo dos processos fotofísicos de duas novas moléculas orgânicas de Corróis (Corrol a (H3(Mebpy)Cor) e b (Ru(Mebpy)Cor), no qual b contém complexo Rutênio) em distintos solventes. Esses estudos foram feitos através de diferentes técnicas espectroscópicas, como, por exemplo, absorção, fluorescência e fluorescência resolvida no tempo. Ambos foram preparados para estudos espectroscópicos em dois solventes diferentes, dimetilsulfóxido (DMSO) e acetonitrila (ACN). Sendo assim, resultados descrevendo a absorção linear, emissão de fluorescência, eficiência quântica de fluorescência (usando o método de Brower (1)) e tempo de fluorescência foram obtidos em função de cada solvente. Além disso, uma solução do corrol a em diclorometano (DCM) foi feita para analisar e levar como referência para os estudos de eficiência uma vez que seus dados já haviam sido estudados. (2) Por fim, a técnica de fluorescência resolvida no tempo foi empregada para determinar o tempo de vida de fluorescência numa janela temporal de nanossegundos, no qual relaxações no estado excitado são detectados, tal técnica consistiu em dois comprimentos de onda de excitação e o método de convolução de sinais para determinar com mais precisão. Os estudos revelaram uma dependência das propriedades fotofísicas com a inserção do complexo de Rutênio na estrutura molecular do Corrol. O Corrol b apresentou um decréscimo considerável da f e do tempo de vida de fluorescência, para ambos os solventes. O que é compreendido pelo fato de que o complexo aumenta a taxa de relaxação não radiativa, ou seja, conversão interna e transferência de população para estados tripletos.

Referências:

1 BROWER, A. M. **Standards for photoluminescence quantum yield measurements in solution**. 2011. Ph.D. Thesis (Doctor) - Universiteit van Amsterdam, Amsterdam, 2011. 2 PIVETTA, R. C. *et al*. Synthesis, photophysical properties and spectroelectrochemical characterization of 10-(4-methylbipyridyl)-5,15-(pentafluorophenyl) corrole. **Journal of Photochemistry and Photobiology A : chemistry**, v. 332, p. 306 – 315, 2017. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2016.09.008

IC35

Uso de nanoemulsão de porfirina para o tratamento de infecções do trato respiratório com Terapia Fotodinâmica

TOMÉ, A. J. B. ; KASSAB, G. ; TOVAR, J. S. D. ; JASINEVICIUS, G. O. ; BUZZÁ, H. H. ; BAGNATO, V. S. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C.

anajuliabarbosatome@usp.br

A Terapia Fotodinâmica (TFD) é uma técnica que é investigada para o tratamento de infecções. Esta é vista como sendo uma alternativa para os tratamentos convencionais hoje muito aplicados como, por exemplo, o uso de antibióticos. O seu princípio consiste em associar luz em um comprimento de onda específico, um fotossensibilizador e oxigênio molecular, a fim de gerar espécies reativas de oxigênio, que são citotóxicas e que são capazes de levar tanto células tumorais como microorganismos à morte. Nesse contexto, a nanotecnologia para o uso de fotossensibilizadores vem ganhando cada vez mais espaço para aumentar a eficiência da TFD. O objetivo deste projeto é analisar a eficácia da nanoemulsão de porfirina (1) e seu efeito fotodinâmico contra a bactéria *S. pneumoniae*, um dos patógenos causadores da pneumonia. (2-3) Para isso, estudos *in vitro* vêm sendo efetuados para a determinação de melhores protocolos. Assim, a concentração de nanopartículas foi variada entre 1nM e 200 μ M, bem como o seu tempo de incubação (variado em zero, 20 minutos e 1 hora). Logo após, as soluções previamente incubadas foram iluminadas por um conjunto de LEDs denominado biotable por 10 minutos, com irradiância de 50 mW/cm², totalizando em uma dose de 30 J/cm². Por fim, com o intuito de verificar a eficácia do tratamento, o crescimento da bactéria foi comparado com grupos controles. Os resultados desse projeto são bastante promissores na aplicação dessas nanoemulsões em terapia fotodinâmica, visto que concentrações de 5nM de fotossensibilizador associado à luz já foram suficientes para eliminar 100% da bactéria *S. pneumoniae*. Assim, é preciso variar as doses de luz para garantir os melhores parâmetros na aplicação do estudo *in vivo* de pneumonia.

Referências:

1 HOU, W. *et al* . A nanoemulsion with a porphyrin shell for cancer theranostics. **Angewandte Chemie International Edition** , v. 58, n. 42, p. 14974-14978, 2019. 2 KASSAB, G. *et al* . Nebulization as a tool for photosensitizer delivery to the respiratory tract. **Journal of Biophotonics** , v. 12, n. 4, p. e201800189-1-e201800189-9, 2019. 3 GERALDE, M. C. *et al* . Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination: an experimental model. **Physiological Reports** , v. 5, n. 5, p. e13190-1-e13190-7, 2017.

IC36

Modelagem e fabricação via 2PP de acopladores ópticos direcionais

JORGE, G. H. A. ; OTUKA, A. J. G.

gabriel.henrique.jorge@usp.br

Dispositivos fotônicos vêm sendo desenvolvidos desde os anos 1960, com o surgimento dos primeiros semicondutores emissores de luz e, na década seguinte, com o desenvolvimento das fibras ópticas. Embora boa parte das pesquisas nesta área utilize plataformas de Si (silicon photonics), nos últimos anos tem havido um crescente interesse no estudo de outros sistemas, como os poliméricos, dada sua flexibilidade de formas, biocompatibilidade e a conveniente facilidade de sua funcionalização - por exemplo, com a incorporação de compostos de interesse. É possível realizar análises computacionais pré-laboratório para avaliar o potencial desses dispositivos, considerando que a situação da fotônica é especialmente favorável para computação: as equações de Maxwell são praticamente exatas, as propriedades relevantes dos materiais são bem conhecidas e as escalas de trabalho não são tão pequenas, resultando que simulações têm concordado consistentemente com experimentos. (1) Neste trabalho, inicialmente, a geometria de acopladores ópticos direcionais será estudada e simulada utilizando um software para aplicação do método computacional de elementos finitos, que consiste em um procedimento numérico para determinar soluções aproximadas de problemas de valores sobre o contorno de equações diferenciais, como as do eletromagnetismo. Dentre as diversas técnicas para a fabricação de dispositivos poliméricos micrométricos, se destaca a fotopolimerização por dois fótons (2PP), método baseado no fenômeno óptico não-linear de absorção multifotônica, previsto inicialmente por Maria Göppert-Mayer. (2) Promovendo o fenômeno em um fotoiniciador, ocorre a quebra de uma ligação e gera-se radicais livres, acarretando na polimerização de resinas acrílicas em uma dada amostra, possibilitando microfabricação com uma resolução inferior ao limite de difração. (3) Com base nos resultados das simulações físicas, dando continuidade ao projeto, pretende-se empregar o método de 2PP para a fabricação dos acopladores, visando aplicá-los a sistemas fotônicos.

Referências:

1 JOANNOPOULOS, J. D. *et al* . Computational photonics. *In* : JOANNOPOULOS, J. D. *et al* . (ed.) . **Photonic crystals** : molding the flow of light. 2nd ed. Princeton: Princeton University Press, 2008. p. 252- 264 2 GÖPPERT-MAYER M. Über elementarakte mit zwei quantensprüngen. **Annalen der Physik**, v. 401, n. 3, p. 273- 294, 1931. 3 OTUKA, A. J. G. **Estruturas poliméricas com nanotubos de carbono** : processamento a laser, caracterização e aplicações. 2016. 108 f. Tese (Doutorado em Ciências e Engenharia de Materiais) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

IC37

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

PAULI, I. G. ; SIPAHI, G. M.

iangiestas@usp.br

O LFC (Laboratório de Física Computacional) ao longo de sua história vem trabalhando em modelos efetivos, usando o método $k \cdot p$ para descrever hetero-estruturas e super-redes. Para tanto, foi criado um software em Fortran para realizar os cálculos de estrutura eletrônica destes sistemas físicos. Possuindo aproximadamente 100 mil linhas escritos em Fortran e 20 anos de existência, o código acabou acumulando uma série de problemas, tornando a manutenção e a implementação de novas funcionalidades uma tarefa muito complicada, sendo então necessária uma revitalização do código original. Usando técnicas de orientação a objetos e práticas modernas em Fortran (1) e gerenciamento de projetos, este trabalho busca gerar uma *API* (interface para programadores), concisa e de utilização intuitiva. Para tanto estão sendo feitas discussões semanais em conjunto com o orientador, a fim de melhorar a arquitetura do projeto, sem deixar de aproveitar técnicas presentes no código antigo, como métodos de diagonalização via LOBPCG e preconditionadores (2-3), reescrevendo-as quando necessário. Além disso, foram testados alguns sistemas de trabalhos anteriores do grupo, para checar se os métodos de resolução e construção produzem resultados corretos e corrigir pequenos detalhes de implementação que podem passar despercebidos. A interface atual já é bem melhor de se usar do que a presente no projeto antigo, porém possui suas falhas, que só podem ser observadas durante a fase de testes, sempre que isso é identificado voltamos a discutir formas de melhorá-la. No entanto, já é possível calcular a estrutura de bandas de sistemas de referência, como bulks de dado um material, e agora também poços quânticos diversos, reproduzindo perfeitamente seus resultados. Apesar do suporte a orientação a objetos em Fortran ser mais recente e rudimentar, a sua utilização tem se mostrado benéfica para organizar e melhorar a experiência do usuário programador. Os principais pontos que precisam ser acertados são acerca de nomenclatura de certos métodos e o manejo de parâmetros e vetores k 's ao longo das classes, além da integração do trabalho de outros colegas, que visam a interfaces de alto nível, para desenho da super rede e discretização da zona de Brillouin.

Referências:

1 CLERMAN, N. S.; SPECTOR, W. **Modern Fortran: style and usage** . New York: Cambridge University Press, 2011. 2 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix computations** . 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013. 3 MEYER, C. **Matrix analysis and applied linear algebra** . Philadelphia: SIAM, 2000.

IC38

Avaliação microbiológica em estudo clínico de fase II: tratamento de faringotonsilite com ação fotodinâmica

GIMENES FILHO, P. G. ; BLANCO, K. C.

pedrogimenesfilho@gmail.com

O objetivo do trabalho foi avaliar a etiologia microbiana durante o uso conjunto de terapias convencional e Terapia Fotodinâmica (TFD) das faringotonsilites agudas em pacientes adultos do município de São Carlos. Pacientes entre 18 e 45 anos que apresentavam como sintoma dor de garganta eram avaliados por médico e, uma vez obtido o consentimento informado, realizou-se a coleta de esfregaço de orofaringe para teste rápido de Estreptococo Beta-Hemolítico do Grupo A (EBHGA), coloração de Gram e cultura em sangue, chocolate e ágar MacConkey. Amostras extras foram congeladas em solução salina e submetidas a PCR para pesquisa de *Fusobacterium necrophorum* (FN). O trabalho foi aprovado pelo CEP da Santa Casa de Misericórdia de São Carlos-SP (CAAE: 83082018.4.0000.8148). Foram avaliados 47 pacientes, com mediana de idade de 23,58 anos, dos quais 26 são do sexo masculino. Foi possível verificar uma prevalência de 26% infecções por EBHGA e 8% relacionadas ao FN. Das cepas isoladas de EBHGA 5 apresentaram resistência a azitromicina representando 62,5% das infecções por EBHGA no estudo, no entanto, 100% das cepas de EBHGA eram sensíveis à penicilina. Outras etiologias bacterianas são apresentadas na Tabela 1. Os resultados confirmam *Streptococcus pyogenes* como principal agente causador de faringotonsilites bacterianas(1) sendo alta a taxa de resistência a macrolídeos desse patógeno no nosso meio. Interessante ressaltar a importante prevalência de infecção por FN, patógeno de difícil diagnóstico através de métodos mais acessíveis e pouco considerado como causa de faringotonsilite na prática clínica.(2)

Tabela 1

Etiologia	N ^o de Amostras	Outros
25 Estreptococo Beta-Hemolítico Grupo A	12	
<i>Fusobacterium necrophorum</i>	4	
Estreptococo Beta-Hemolítico Grupo B	2	
<i>Staphylococcus aureus</i>	1	
Estreptococo Beta-Hemolítico Grupo C	1	
<i>Haemophilus influenzae</i>	1	
<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	1	
<i>Prevotella intermedia</i>	1	

Referências:

1 HEDIN, K, *et al* . The aetiology of pharyngotonsillitis in adolescents and adults - *Fusobacterium necrophorum* is commonly found. **Clinical Microbiology Infections** , v..21, n.3,p.263.e1-7,.2015. 2 JENSEN, A. *et al* Detection of *Fusobacterium necrophorum* subsp. *funduliforme* in tonsillitis in young adults by real-time PCR. **Clinical Microbiology Infections** , v.13, n.7,p.:695-701,2007.

IC39

Estudos de toxicidade de nanorods para aplicações em nanomedicina

ZUCOLOTTO, V. ; LINS, P. M. P. ; ALVES, J.

joyce.alves.pereira@hotmail.com

A nanotecnologia é atualmente aplicada em diversas áreas, dentre elas, a medicina, uma área denominada como nanomedicina. Essa área tem o intuito de melhorar tratamentos existentes e desenvolver novas terapias. Contudo, mesmo tendo sido rapidamente aceita, há preocupações que devem ser levadas em conta, como a toxicologia e efeitos adversos decorrentes da interação dos nanomateriais com sistemas biológicos. Obtendo-se essas informações é possível o desenvolvimento da nanotecnologia de uma forma segura e translacional.(1)Dentre os nanomateriais, os nanorods de ouro (AuNR) se destacam, devido à presença da banda plasmônica longitudinal, que lhes confere absorção eletrônica na região do infravermelho e a facilidade de modificação de superfície, sendo utilizados em terapia fototérmica plasmônica.(2) Esse projeto visa analisar a toxicidade desses nanorods de ouro através de estudos in vitro em três linhagens celulares diferentes: macrófagos (RAW264.7), células do tumor de mama (4T1) e células saudáveis (L929). Esses estudos poderão trazer benefícios para a área da nanomedicina, como seu desenvolvimento e maior entendimento da toxicidade de nanomateriais.(3)

Referências:

1 BOULAIZ, H. *et al* . Nanomedicine: application areas and development prospects. **International Journal of Molecular Sciences** v. 12, n.5,p. 3303-3321,2011. 2 HUANG, X.; JAIN, P. K.; EL-SAYED, I. H. Plasmonic photothermal therapy (PPTT) using gold nanoparticles. **Laser in Medical Science** , v.23, p. 217–228, 2008.DOI 10.1007/s10103-007-0470-x. 3 JIN, N.; ZHANG, Q.; YANG, M. Detoxification and functionalization of gold nanorods with organic polymers and their applications in cancer photothermal therapy. **Microscopy Research Technique** , v.82, n.6,p.670-679,2019.

IC40

Comparação de métodos para quantificação do efeito vascular da terapia fotodinâmica em modelo de membrana corioalantóica

FERREIRA, G. C. ; BAGNATO, V. S. ; BUZZÁ, H. H.

giane.ferreira@usp.br

O modelo de Membrana Corioalantóica (CAM) é um modelo muito utilizado para estudos de efeito vascular pois permite o acesso direto aos vasos sanguíneos. O objetivo deste projeto foi avaliar o efeito vascular da Terapia Fotodinâmica (TFD) no modelo de Membrana Corioalantóica, usando diferentes formulações de curcumina. Ademais, também queríamos comparar três métodos de quantificação do efeito vascular em CAM. A Terapia Fotodinâmica consiste no uso de uma fonte de luz, um fotossensibilizador e oxigênio molecular para que seja possível formar oxigênio singleto, que é altamente reativo e leva à morte celular. (1) Ovos fertilizados de galinha foram recolhidos na fábrica A'doro. Eles permaneceram na estufa à 37,7°C. No 11º dia de desenvolvimento embrionário, as formulações de gel de curcumina (à base de carbopol) na concentração de 0,5mM eram aplicadas sobre a membrana corioalantóica, numa região delimitada por um anel de Teflon® de 1cm² e 1mm de espessura. Após 40 min de incubação, era feita a Terapia Fotodinâmica usando um aparelho com LED de 450nm, cuja irradiância era de 50mW/cm² e o tempo de iluminação era de 5 minutos. Foram feitas imagens usando uma câmera USB Digital Microscope antes da aplicação, a cada 30 minutos nas 3 primeiras horas e 24 horas após o tratamento. Para analisar o efeito vascular foram utilizados três métodos de quantificação: diâmetro dos vasos sanguíneos, contagem de pontos de ramificação e área total de vasos. As imagens eram analisadas com os softwares ImageJ e MatLab. Com o método de diâmetro de vasos sanguíneos foi observado que os grupos de curcumina-gel tiveram um efeito vascular, e quando associada com a TFD o efeito de redução do diâmetro foi intensificado. Para os grupos que apresentaram efeito vascular intenso, os métodos mostraram grande semelhança quando comparados. Porém, quando o efeito vascular era mais brando, os métodos se tornaram mais importantes na escolha da análise. A Terapia Fotodinâmica intensificou o efeito vascular da curcumina e utilizando a formulação em gel mantivemos uma boa entrega da curcumina na CAM. Os métodos de quantificação analisados apresentam boa semelhança mas é necessário ter cautela quanto à escolha quando o efeito vascular é brando.

Referências:

1 BUZZÁ, H. H. *et al* . Vascular effects of photodynamic therapy with curcumin in a chorioallantoic membrane model. **International Journal of Molecular Sciences** , v. 20, n. 5, p. 1084-1-1084-12, 2019.

IC41

Estudos espectroscópicos de uma nova classe de porfirinas base livre

KNOPKI, H. ; AKIYAMA, J. ; BONI, L. D.

hkнопki@usp.br

O trabalho teve como principal finalidade o estudo dos processos fotofísicos de duas moléculas orgânicas da classe das porfirinas (Porfirinas a e b, que diferem na extensão da cadeia carbônica ligada ao anel porfirínico) em quatro solventes diferentes. Foram utilizadas técnicas espectroscópicas tais como absorção, fluorescência e fluorescência resolvida no tempo, além de técnicas de convolução de sinais para se obter a resposta temporal da fluorescência. Foram preparadas soluções de cada porfirina em quatro solventes diferentes, diclorometano (DCM), hexano (Hex), tetraidrofurano (THF) e clorofórmio (CLR). Para cada solução foram medidos os espectros das absorvidades molares e emissões de fluorescência. Também foi obtida as eficiências quânticas de fluorescência (f), e os tempos de vida de fluorescência (τ). A eficiência quântica de fluorescência foi obtida através da comparação com uma amostra padrão, no caso a amostra de hematoporfirina, altamente estudada e conhecida como uma das referências para a aplicação do método de Brower. (1) Para determinar o tempo de vida de fluorescência em uma janela temporal de nanosegundos, no qual é detectado processo de relaxação do primeiro estado excitado para o estado fundamental, foi usado um laser pulsado com largura temporal de 220 fs. O sinal em função do tempo foi analisado com o método de convolução de sinais para eliminar as respostas do aparelho e da luz espalhada no alargamento do tempo de vida de fluorescência. As eficiências quânticas de fluorescência medidas foram todas em torno de 1% a 2% e os tempos de vida de fluorescência variaram de 8,5 ns a 11,3 ns, dependendo do solvente. A solução da porfirina a em hexano não mostrou intensidade de fluorescência suficiente para se medir, assim como a porfirina b dissolvida em DCM. As soluções em clorofórmio apresentaram uma reação fotoinduzida impossibilitando as medidas de f . A análise em diferentes solventes não resultou em mudanças significativas nas eficiências quânticas de fluorescência, que foi de 1 a 2% para ambas as moléculas, o que era esperado devido à sua similaridade. Os tempos de vida de fluorescência apresentam dependência maior com o solvente no caso da porfirina a, enquanto na porfirina b, não houve mudança expressiva.

Referências:

1 BROUWER, A. M. Standards for photoluminescence quantum yield measurements in solution. **Pure and Applied Chemistry**, v. 83, n. 12, p. 2213-2228, 2011.

IC42

Caracterização da distribuição de elementos transponíveis no genoma de *Clonorchis sinensis*

MIASSI NETTO, L. ; MARCO, R. D.

leonardo.netto@usp.br

A premissa para o desenvolvimento do trabalho foi encontrar padrões na distribuição dos elementos de transposição no genoma do *Clonorchis sinensis*, através de ferramentas e análises de bioinformática. Com isso poderíamos tentar descobrir se o comportamento exercido pelos elementos ocorrem de forma estocástica ou possuem uma influência do contexto genômico para direcionar suas inserções e dessa forma direcionar mudanças na arquitetura dos genes do organismo. Utilizando o programa *Repeat Scout* (1) detectamos sequências repetitivas e em seguida identificamos seus domínios transcriptase reversa. Com o programa MrBayes utilizando uma análise de inferência bayesiana das diversas transcriptases reversas de elementos que já estão descritos na literatura e com a adição das transcriptases reversas dos nossos novos elementos, foi gerada uma árvore filogenética de transposon do tipo LTR e não_LTR. As coordenadas da localização das cópias dos elementos de transposição de cada família foram encontradas através do programa *Repeat Masker*. (2) Tendo as coordenadas é possível mapear as localizações no arquivo GFF, possibilitando classificar os elementos como intragênicos ou intergênicos. Além disso, com o arquivo GFF ainda é possível encontrar as regiões existentes entre dois elementos de transposição, tendo como objetivo identificar mecanismos e tendências de inserções dentro dos próprios transposons. Foi avaliado se existe uma relação do padrão de expressão gênica de um gene com a inserção dos elementos de transposição, através dos dados de RNA-Seq proveniente de amostras de diferentes estágios do ciclo de vida e diferentes tecidos; e cada uma das bibliotecas será mapeada no genoma do nosso verme de estudo utilizando a ferramenta HiSAT2. (3) Os reads posteriormente foram utilizados para o cálculo de normalização dos valores de RPKM para cada um dos genes, em cada uma das bibliotecas analisadas. Estes dados permitiram avaliar se um elemento de transposição que possui inserção em um conjunto de genes apresenta características relativas ao seu perfil de expressão significativamente diferentes do conjunto total de genes. Nossos resultados demonstram que os clados de retrotransposons predominantes no platelminto *Clonorchis sinensis* são os mesmos presentes no genoma do platelminto *Schistosoma mansoni*, o que indica que a colonização destes genomas por tais elementos deve ter acontecido na base dos trematodas. Além disso, os transposons encontrados parecem ter a tendência a inserir preferencialmente em introns mais próximos ao 5' dos genes. Os níveis de expressão dos genes não aparentam influenciar a preferência de inserção dos elementos. A distribuição de reads de RNASeq de modo relativamente uniforme nas sequências de transposons é sugestivo de que não exista expressão de um número alto de cópias não autônomas ou truncadas transcricionalmente ativas para estes elementos, sendo provavelmente a maioria dos transcritos derivados de cópias íntegras.

Referências:

1 PRICE, A. L.; JONES, N. C.; PEVZNER, P. A. De novo identification of repeat families in large genomes. **Bioinformatics** , v. 21, suppl. 1, p. i351-i358, 2005. 2 SMIT, A. F. A.; HUBLEY, R.; GREEN, P. **RepeatMasker open-4.0** . 2013-2015. Disponível em: <http://www.repeatmasker.org>. Acesso em: 02 out. 2020. 3 KIM, D.; LANGMEAD, B.; SALZBERG, S. L. HISAT: a fast spliced aligner with low memory requirements. **Nature Methods** , v. 12, n. 4, p. 357-360, 2015.

IC43

Modelo de convolução de sinais e obtenção da função resposta para determinação do tempo de fluorescência

PEREIRA, V. A. M. C. ; BONI, L. D.

victoramcp@usp.br

O objetivo principal do estudo foi obter correções na medida do tempo de fluorescência de forma automática (computacionalmente). Como objetivo secundário o programa também conectou o osciloscópio DPO7000C de alta amostragem ao computador do laboratório. As medidas foram realizadas com o laser Carbide (laser com feixe de comprimento de onda em 515 nm e 200 femtossegundos de largura de pulso), amostras variadas, uma lente convergente e uma fibra óptica conectada a um fotodetector que estava conectado ao osciloscópio. Lasers com pulsos de larguras temporais ultracurtas, como o Carbide, possibilitaram o desenvolvimento de técnicas de espectroscopia resolvida no tempo que permitiram obter respostas temporais em escalas inferiores a nanossegundos. Essa evolução permitiu o estudo de processos fotoquímicos e fotofísicos ultrarrápidos, sendo assim, uma das evoluções técnicas que possibilitaram o desenvolvimento deste trabalho, uma vez que alguns compostos orgânicos têm tempo de vida de fluorescência na ordem de nanossegundos, que é, em geral, da ordem do tempo de resposta dos equipamentos de medição. Essa resposta é chamada de função resposta do instrumento (conhecida como IRF - *Instrument Response Function*) (1) e faz com que o sinal medido seja diferente do sinal do espécime. Desse modo, nos casos em que a IRF é significativa na ordem do tempo de vida de fluorescência da amostra analisada, precisa-se levar a IRF em consideração para uma análise mais precisa. Por fim, para medir a IRF, pode-se utilizar pulsos de laser com largura temporal ultracurta e utilizar o método de convolução com funções Delta de Dirac (DFCM - *Delta Function Convolution Method*). (2) Adquirindo a IRF e fazendo a medição, pode-se obter a verdadeira curva de fluorescência (sem interferência da IRF). Para encontrar a função de decaimento da amostra por meio da convolução, é utilizada uma função palpite, cujos parâmetros iniciais são chutes e assim, observa-se o desvio do sinal medido em relação a convolução da função palpite com a IRF, para fim de ajustar os parâmetros das exponenciais até chegar em algo próximo ao sinal medido no osciloscópio, podendo encontrar curvas baseadas na convolução com a IRF com até 3 exponenciais normalizadas. Como uma forma de calibragem, foram utilizadas amostras com Rodamina B e Rodamina 6G, cujos tempos de vida de fluorescência são bem conhecidos e tabelados. (2-3) As amostras escolhidas foram: Rodamina B dissolvida em água (concentração de 0.0001 molar), Rodamina 6G dissolvida em água (concentração de 0.0001 molar) e Rodamina B dissolvida em etanol (concentração de 0.0001 molar). Após a verificação de que os tempos encontrados eram coerentes com os tempos tabelados, também se utilizou o programa para a definição de tempo de vida de fluorescência de 3 amostras inéditas que estavam sendo estudadas no laboratório (Purinas em diclorometano), de modo que esses ajustes mostraram que o programa pode obter uma precisão de 3% para tempos da ordem de 1ns. Portanto, o programa mostra como uma boa forma de obter ajustes para medidas de tempo de vida de fluorescência.

Referências:

1 ZUKER, M. *et al* . Delta fuction convolution method (DFCM) for fluorescence decay expriments. **Review of Scientific Instruments** , v. 56, n. 1, p. 14-22, 1985
2 TALBOT, C. B. *et al* . Correction approach for delta function convolution model fitting of fluorescence decay data in the case of a monoexponential reference fluorophore. **Journal of Fluorescence** , v. 25, n. 5, p. 1169-1182,

2015. 3 KRISTOFFERSEN, A. S. *et al* . Testing fluorescence lifetime standards using two-photon excitation and time-domain instrumentation: rhodamine B, coumarin 6 and lucifer yellow. **Journal of Fluorescence** , v. 24, n. 4, p. 1015 -1024, 2014.

IC44

Avaliação clínica de estudo clínico de fase II: tratamento de faringotonsilites causadas por *S. pyogenes* com ação fotodinâmica

BASILE, D. ; BLANCO, K. C.

dbasilee@outlook.com

O objetivo do estudo foi avaliar as características clínicas de adultos com faringotonsilites agudas por *Streptococcus pyogenes* (EBHGA) (1) e por outras etiologias (não EBHGA) em ensaio clínico de fase II de terapia fotodinâmica (TFD), em São Carlos (SP). Foram recrutados pacientes com faringotonsilites agudas que assinaram o TCLE, sendo submetidos a anamnese e exame físico detalhados incluindo sinais vitais e oroscopia. Posteriormente foram submetidos à coleta de esfregaço de orofaringe para teste rápido imunocromatográfico para EBHGA (TR), coloração de Gram e cultura em ágar sangue. Os pacientes foram classificados em grupo A (EBHGA) e grupo B (não EBHGA) pelo TR, e randomizados para: Grupo A1 – amoxicilina + TFD; Grupo A2 – amoxicilina + placebo TFD; Grupo B1 – diclofenaco + TFD; Grupo B2 – diclofenaco + placebo TFD. Para a aplicação da TFD, foi necessário o consumo de uma bala curcumina (22,5 mg) associado à aplicação de LED 450 nm em orofaringe por 5 min. Este trabalho foi aprovado pelo CEP da Santa Casa de Misericórdia de São Carlos (CAAE: 83082018.4.0000.8148). Foram admitidos 47 pacientes com faringotonsilite aguda, sendo 25 homens, e idade média de 24,8 anos. Dos sinais e sintomas avaliados, purulência em tonsilas foi característica, mas não exclusiva de faringotonsilite por EBHGA. Outras etiologias apresentaram mais ardor local. As manifestações sistêmicas foram semelhantes nos grupos.

Referências:

1 BISNO, A. L. *et al.* Practice guidelines for the diagnosis and management of group A *Streptococcal pharyngitis*. **Clinical Infectious Diseases**, v. 35, n. 2, p. 113-125, 2002.

IC45

Desenvolvimento de filmes de CuWO₄ e estudo das propriedades eletrônicas para aplicação na fotossíntese artificial

RABELO, L. ; GONÇALVES, R.

lucasgr_17@usp.br

Em decorrência da crescente demanda energética e a necessidade de reduzir a emissão de gases poluentes na atmosfera, torna-se imprescindível o estudo por fontes de energias limpas e renováveis. Nesse contexto, a fotossíntese artificial emerge como uma solução para os problemas mencionados: através da fotocatalise da água é possível converter a energia solar em H_2 , sendo este o principal candidato para substituir os combustíveis fósseis. (1) Em particular, a fotossíntese artificial emprega materiais semicondutores para a fotocatalise da água; entretanto, uma série de limitações intrínsecas desses semicondutores reduz a eficiência de produção de H_2 . Dessa forma, o grande desafio consiste em sintetizar materiais semicondutores que possuam as seguintes características: absorção da luz visível, estabilidade em soluções eletrolíticas e alta eficiência na foto-conversão de energia solar em combustíveis químicos. Dentre os diversos materiais, o tungstato de cobre (CuWO₄) é um semicondutor óxido tipo-n promissor para fotossíntese artificial, uma vez que seu band gap apresenta faixa de absorção no visível (2,2 eV) e possui alta estabilidade química. (2) Embora diversas sínteses e estratégias tem sido utilizadas para aprimorar a eficiência do CuWO₄ na fotossíntese artificial, a maioria dos estudos apontam baixas densidades de fotocorrente (0,3mA/cm²) muito menores que o valor teórico máximo de 10.7 mA/cm² em +1.23 V vs. RHE, (3), o que justifica novos estudos para alcançar esse máximo teórico. Assim sendo motivado pelo potencial do tungstato de cobre na fotossíntese artificial, este projeto de pesquisa tem como objetivo principal o estudo e desenvolvimento de filmes finos de CuWO₄ para aplicação na fotocatalise da água. Em particular, o composto CuWO₄ será sintetizado conjuntamente via reação dos precursores poliméricos e spin-coating. A escolha por tal método deve-se a versatilidade, baixo custo e fácil reprodutibilidade da síntese. Em relação aos resultados preliminares obteve-se êxito na produção dos filmes finos de CuWO₄ via método dos precursores poliméricos. A caracterização da fase cristalina foi realizada por difração de raios-X e evidenciou a formação única de CuWO₄. A espectroscopia eletroquímica de impedância (EIS) foi realizada para estudar a cinética de transferência de cargas na interface do fotoanodo e eletrólito. Por fim, a aplicação dos filmes finos de CuWO₄ na fotossíntese artificial foi conduzida através de testes fotoeletroquímicos (PEC): a densidade de fotocorrente obtida coincidiu com aquela reportada na literatura.

Referências:

1 COX, N. *et al* . Artificial photosynthesis: understanding water splitting in nature. **Interface Focus** , v. 5, n. 3, p. 20150009, 2015; 2TANG, Y. *et al* . Enhancement of the photoelectrochemical performance of CuWO₄ films for water splitting by hydrogen treatment. **Applied Surface Science** , v. 361, p. 133-140, 2016. DOI: 10.1016/j.apsusc.2015.11.129. 3 TIAN, C. *et al* . Elucidating the electronic structure of CuWO₄ thin films for enhanced photoelectrochemical water splitting. **Journal of Materials Chemistry A** , v. 7, n. 19, p. 11895, 2019.

IC46

Introdução à física de buracos negros e a algumas soluções exóticas da relatividade geral

RAIA NETO, M. ; BOTTI, L.

mraianeto@gmail.com

As equações dinâmicas que definem o movimento de um corpo na presença de um campo gravitacional gerado por uma distribuição de matéria e energia, são dadas então pelas Equações de Einstein. (1) As soluções das Equações de Einstein são então expressas pelo tensor métrico, sendo assim possível então definir geometrias convenientes e então procurar qual seriam as distribuições de matéria e energia que poderiam causar tal geometria no espaço-tempo. O presente projeto estudou algumas soluções da Equações de Einstein: as soluções que Schwarzschild, Kerr, Reissner-Nordström e Kerr-Newman, e duas outras soluções -ditas exóticas-chamadas de Wormhole de Morris-Thorne e Warpdrive de Alcubierre. As soluções de Schwarzschild, Kerr, Reissner-Nordström e Kerr-Newman definem então, respectivamente, um espaço-tempo que modela corpos esféricos sem carga e sem rotação, um espaço-tempo que modela corpos com simetria axial, com rotação e sem carga elétrica, um espaço-tempo que modela corpos esféricos, sem rotação e com carga elétrica e magnética e, por fim, um espaço-tempo que modela corpos com simetria axial, com rotação e com carga elétrica e magnética. Sob alguns limites dentro das soluções, tais geometrias levam ao conceito de Buraco Negro. Com respeito as soluções exóticas; a solução (ou classe de soluções) de um Wormhole permite uma noção de "ponte" entre duas regiões muito afastadas distintas de um espaço-tempo. (2) Já a solução do Warpdrive infere uma geometria que restaura a noção de "viagem super-luminal". (3) O mérito de tais soluções, do ponto de vista do presente projeto, reside então no estudo das chamadas condições de energia. Tais condições, basicamente, são impostas às Equações de Einstein, para definir a viabilidade física de um espaço-tempo; tais condições então dizem respeito ao tipo de distribuição de energia e matéria que são razoáveis fisicamente. As soluções de Wormhole e Warpdrive em geral levam a condições de energia fisicamente não aceitáveis. Especificamente, uma solução particular de Wormhole de Morris-Thorne para uma dada função de forma específica será discutida brevemente.

Referências:

1 CHARLES, W.M.; THORNE, S. K.; WHEELER, J. A. **Gravitation** . 2nd ed. San Francisco: Clarendon Press, 2017. 2 MORRIS, M. S.; THORNE, K. S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: a tool for teaching general relativity. **American Journal of Physics** , v.56, n.5, p.395,1988. 3 ALCUBIERRE, M. Warpdrives: hyper-fast travel within general relativity. **Classical and Quantum Gravity** ,v.11, n.5, p.L73, 1994.

IC47

Fabricação de estruturas periódicas via transferência direta a laser

COUTO, F. ; MENDONCA, C.

filipe.couto@usp.br

Este trabalho tem como objetivo investigar propriedades fotônicas de uma estrutura periódica fabricada em vidro calcogeneto As_2S_3 pelo processo de transferência direta a laser (1), e avaliar a possibilidade de uso de tal estrutura como um guia de onda por bandgap fotônico (PBG). Inicialmente foi utilizado o software MPB para determinar a relação de dispersão da estrutura. (2) Em seguida, o software Meep foi utilizado para realizar simulações no domínio do tempo e avaliar a eficiência de um guia de onda inscrito na estrutura periódica. Por fim, foi montado um aparato para acoplar luz nas estruturas por meio de fibra óptica. Foram usadas duas fontes laser, uma operando em 632 nm e outra em 530 nm, dentro e fora da região de PBG respectivamente. Por meio do *software* MPB, foram encontrados PBGs para luz com polarização TM nas regiões entre 582 a 639 nm. Simulações no domínio do tempo apontam considerável guiamento de luz dentro nas regiões de PBG, mesmo para estruturas de pequenas dimensões e com imperfeições. A análise das imagens obtidas utilizando o aparato experimental indicam a possibilidade de haver de fato guiamento nas estruturas, porém sem diferenças significativas entre as fontes laser nas regiões dentro e fora do PBG. Analisando por meio do *software* MPB os possíveis modos da estrutura periódica incluindo o guia inscrito, observa-se modos guiados para regiões que vão além das regiões de PGB total, incluindo 530 nm. Concluímos que os resultados obtidos através de simulações numéricas no domínio do tempo e da frequência sugerem a possibilidade do uso da estrutura fabricada via LIFT como um guia de onda via PBG. Os resultados experimentais não foram conclusivos, porém não descartam a possibilidade de haver guiamento nas estruturas, justificando a continuidade do estudo.

Referências:

- 1 ALMEIDA, J. M. P. *et al* . Sub-wavelength self-organization of chalcogenide glass by direct laser-writing. **Optical Materials** , v. 84, p. 259-262, Oct. 2018
- 2 JOANNOPOULOS, J. D. *et al* . **Photonic crystals** : molding the flow of light. 2nd ed. Princeton: Princeton University Press, 2008. 304 p.

IC48

Produção de espécies reativas de oxigênio na combinação de Fotobiomodulação e Terapia Fotodinâmica

COSTA, C. ; FARIA, C. ; BAGNATO, V. S.

camilla.santos.costa@usp.br

O trabalho visa analisar a viabilidade celular após protocolo combinado de Fotobiomodulação (PBM) (1) e Terapia Fotodinâmica (TFD) (2) em células de carcinoma espinocelular (SCC) oral, bem como investigar os efeitos da produção de espécies reativas de oxigênio (EROs) na combinação das técnicas. Células de carcinoma espinocelular oral, SCC-25 (ATCC® CRL-1628™) e SCC-4 (ATCC® CRL-1624™), foram inoculadas em placas multiposos e iluminadas para PBM nos parâmetros 780nm-5J/cm². A TFD foi realizada 4h após PBM, utilizando o fotossensibilizador Photogem® a 5µg/mL com iluminação de 630nm e 15J/cm². Para avaliar a contribuição da geração de EROs na PBM, solução de ácido ascórbico (AA) a 100µM foi incubada 2h antes da PBM. A produção de EROs após TFD foi analisada por citometria de fluxo com o marcador de estresse oxidativo DCFH-DA, a 25µM, acrescentado imediatamente antes iluminação para TFD. A viabilidade celular foi, então, quantificada pelo método MTT 24h após TFD. A produção de EROs após TFD mostrou que a PBM foi capaz de induzir um aumento de 20% na quantidade relativa de EROs para a SCC-25 e não provocou mudança significativa para a SCC-4. Indicando que a diferença na produção de EROs após TFD é um dos causadores da diferença de resposta entre as linhagens frente a combinação PBM-TFD. O ácido ascórbico, por sua vez, é um potente antioxidante (capaz de eliminar EROs) e inibiu a resposta à PBM de modo a equiparar a viabilidade dos grupos AA a dos grupos não submetidos a PBM. Isso indica que a geração de EROs é primordial para a ativação das vias que promovem os efeitos da PBM.

Referências:

1 DE FREITAS, L. F.; HAMBLIN, M. R. Proposed mechanisms of photobiomodulation or low-level light therapy. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics** , v. 22, n. 3, p. 7000417, 2016. DOI: 10.1109/JSTQE.2016.2561201. 2 ROBERTSON, C. A.; EVANS, D. H.; ABRAHAMSE, H. Photodynamic therapy (PDT): a short review on cellular mechanisms and cancer research applications for PDT. **Journal of Photochemistry and Photobiology B** , v. 96, n. 1, p. 1-8, 2009. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2009.04.001.

IC49

Machine learning optimization of a magneto-optical trap

SANTOS, L. M. D. S. M. D. ; TELLES, G. D.

lucasmdesa@usp.br

The production and manipulation of neutral atomic samples prepared with the help of lasers is a decades-old and well-established practice, and its use has allowed significant scientific discoveries. This is made evident by the fourteen Nobel Prize in Physics laureates between the years 1997 and 2018, whose research was either directly or indirectly associated with the use of these systems. The complex dynamics of systems with many-body interactions make precise analytical optimization of trapping and cooling mechanisms not feasible. On the other hand, in recent years the use of machine learning has become ever more efficient and suited for aiding and accelerating the investigation of empirical models of complex systems. A machine learning approach can produce tools that make computers capable of surpassing human analytical capabilities, especially when dealing with large datasets in systems dependent on a wide range of independent parameters. As a result, machine learning might be able to find counterintuitive solutions to problems that may go unnoticed even by experienced researchers. In this project, we applied machine learning to optimize the preparation of cold, neutral atomic samples, through the use of a computational tool developed specifically for the online optimization of experimental control systems, the Machine Learning Online Optimization Package, or simply M-LOOP. This tool was originally developed to optimize the production of Bose-Einstein condensates, utilizing the width of the edges of the atomic cloud as a performance test and applying a Gaussian process (GP) algorithm. (1) It was later used for the optimization of a magneto-optical trap, with the optical depth as a performance measure and the implementation of a neural network (NN).(2) In this project, we propose the use of this tool to optimize a magneto-optical trap based on the trap loading time evolution. These loading curves are well described by the Reif model, which associates the rate at which the trapped population varies to a constant loading rate and a loss rate proportional to the trapped population, due to inelastic collisions between trapped and free atoms.(3) The loading rate is determined, for a real curve, by applying simple linear regression to the initial, approximately linear, region. With the loading rate fixed, fitting of the Reif model to the entire curve with a trust-region reflective algorithm determines the loss rate. These two quantities may then be used as a performance test to optimize the loading process, resulting in faster loading and higher densities of the trapped cold gas.

Referências:

- 1 WIGLEY, P. B. *et al* . Fast machine-learning online optimization of ultra-cold-atom experiments. **Scientific Reports** , v. 6, n. 1, 2016. DOI: 10.1038/srep25890
- 2 TRANTER, A. D. *et al* . Multiparameter optimisation of a magneto-optical trap using deep learning. **Nature Communications** , v. 9, p. 4360, 2018. DOI: 10.1038/s41467-018-06847-1
- 3 MONROE, C. *et al* . Very cold trapped atoms in a vapor cell. **Physical Review Letters** , v. 65, n. 13, p. 1571, 1990

IC50

Desenvolvimento de algoritmos de reconstrução de fase para microscópio óptico sem lentes

OLIVEIRA, N. P. D. ; D'ALMEIDA, C. D. P. ; PRATAVIEIRA, S.

nataliportes@usp.br

O desenvolvimento da microscopia holográfica digital sem lentes surge como uma alternativa aos modelos tradicionais de microscópios ópticos. Além de trazerem uma instrumentação simples, proporcionam um campo de visão superior por conseguirem desacoplar essa limitação com a resolução do sistema. No entanto, por serem fundamentados no tratamento digital, possuem dificuldades específicas desse tipo de sistema. Os hologramas precisam passar por uma reconstrução digital que inclui a recuperação da fase perdida durante a captação do holograma. Para tal finalidade, esse projeto explorou dois métodos computacionais. No método "Multi-Alturas", diferentes hologramas de uma mesma amostra são obtidos com múltiplas distâncias entre amostra-sensor.(1) O algoritmo implementado usa esses hologramas como entrada para os cálculos que convergem a um valor de fase. Já no "Multiespectral", hologramas com diferentes comprimentos de onda são usados para que a partir de um cálculo envolvendo os valores experimentais, se calcule uma fase. (2) Os processamentos utilizados necessitam de um valor preciso do foco da imagem (3), para tal também foi implementada uma rotina computacional para o cálculo do foco, que antes era feito de forma manual com a informação do instrumento. Os dois métodos conseguiram ser implementados nos protótipos em desenvolvimento no grupo de pesquisa. Os processamentos foram feitos com imagens de um alvo padrão USAF-1951 e, também, de uma cultura de células. A resolução do sistema é de aproximadamente $4 \mu\text{m}$ com um campo de visão aproximado de 30mm^2 .

Referências:

1GREENBAUM, A.; OZCAN, A. Maskless imaging of dense samples using pixel super-resolution based multi-height lensfree on-chip microscopy. **Optics Express** , v. 20, n. 3, p. 3129-3143, 2012. 2 ALLIER, C. *et al* . Imaging of dense cell cultures by multiwavelength lens [U+2010] free video microscopy. **Cytometry A** , v. 91, n. 5, p. 433-442, 2007. 3 TAMAMITSU, M. *et al* . **Comparison of Gini index and Tamura coefficient for holographic autofocus based on the edge sparsity of the complex optical wavefront** .2017. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1708.08055>. Acesso em: 6 out.2020.

IC51

Análise da distribuição do elemento de transposição SM1-alpha no genoma do parasita *Schistosoma mansoni*

SANTOS, J. P. C. D. ; MARCO, R. D.

joao.cassucci@usp.br

O objetivo deste projeto é realizar uma análise sobre a disposição do elemento de transposição SM1-alpha no genoma do parasita extit*Schistosoma masoni*. Para tais análises, foram levadas em consideração fatores como: conteúdo CG, nível de expressão gênica em RPKM e presença de acetilações de histona do tipo H3K27me3. Além destas análises, foram também estudadas as expansões dos elementos SM1-alpha em outras espécies pertencentes ao gênero *Schistosoma*. Foi utilizado como método para análise dos arcaouços dos genomas a prática de janelas deslizantes, com um intervalo de 5Mbp deslocadas 10Kbp entre si. Para realização das análises, o banco de dados *Wormbase* foi utilizado, de onde foram retirados os arquivos FASTA e GFF3 do genoma do *S. mansoni*. (1) Para avaliar se há alguma correlação entre a presença dos elementos de transposição e os parâmetros conteúdo CG, número de genes e RPKM, utilizou-se janelas independentes de 1Mbp e 300Kbp que tiveram a correlação de Pearson e Spearman tomadas para análise. Para verificar se houveram expansões do transposon em outras espécies, foram utilizados arquivos SRA de leituras curtas do genoma de outras 8 espécies de *Schistosoma*. Estas leituras foram alinhadas com a sequência do transposon para verificar se ele estava contido nelas ou não. O resultado foi apresentado como o número de leituras contendo o elemento dividido pelo número total de leituras. O último experimento envolveu a montagem do perfil de expressão da acetilação H3K27me3 obtido através de experimentos CHIP-Seq (2), também com a utilização de janelas de 5Mbp. No geral, foi verificada uma correlação linear negativa significativa entre o número de transposons e o conteúdo CG, além do número de genes e de expressão em RPKM. Sobre as expansões em outras espécies, verificou-se expansões do elemento SM1-alpha paralelas a ocorrida no *Schistosoma mansoni*. Concluindo, o transposon tende a estar disposto em regiões com menos genes, baixo conteúdo CG e baixa expressão em RPKM, além de ter expandido também em outras espécies.

Referências:

1 HOWE, K. L. *et al* . WormBase ParaSite: a comprehensive resource for helminth genomics. **Molecular and Biochemical Parasitology** , v. 215, p. 2-10, July 2017. 2 PAYÃ-MILANS, M. *et al* . Genome-wide analysis of the H3K27me3 epigenome and transcriptome in *Brassica rapa* . **GigaScience** , v. 8, n. 12, p. giz147-1-giz147-13, Dec. 2019.

IC52

Análise multiparamétrica do problema de fases em cristalografia de proteínas por aprendizado profundo. Caso de estudo: lisozima da clara do ovo de galinha

JUCOVSKI, A. ; AMBROSIO, A.

andre.jucovski@usp.br

O problema de fases é notório na cristalografia de proteínas por difração de raios X. A perda experimental de informações sobre as fases das ondas espalhadas construtivamente pelos componentes do cristal derivam de limitações tecnológicas intrínsecas aos sistemas de detecção dessa radiação. (1) Assim, é impossibilitado o cálculo direto da função de distribuição de densidade eletrônica na cela unitária através de uma transformada de Fourier. Atualmente, há dois métodos experimentais que podem ser aplicados para contornar esse problema (2): (i) a quantificação seletiva do componente dispersivo (λ -dependente) do fator de espalhamento atômico ou (ii) a substituição parcial do solvente aquoso ordenado por íons mais elétrons-densos (metálicos ou halogênicos). Alternativamente, informações prévias, na forma de estruturas cristalinas conhecidas que são funcionalmente relacionadas ou homólogas a componentes no cristal, podem servir como fonte de um conjunto inicial de fases. Apesar de desafiadoras, quando viáveis, as aplicações desses diferentes métodos já possibilitaram a determinação de mais de uma centena de milhares de modelos atômicos, para as mais diversas proteínas (e seu complexos). Tendo em vista a existência de uma coleção de informações estruturais já disponibilizadas no banco de dados *Protein Data Bank*, propomos uma análise multiparamétrica do problema de fases, com base em aprendizagem de máquina profunda. (3) Nossa hipótese é a de que um mapeamento extensivo de observações sobre distribuições de fases conhecidas pode resultar em um modelo preditivo, que permita conclusões sobre o valor de fase de reflexões ainda desconhecidas, eliminando a necessidade de experimentos adicionais ou de estruturas homólogas. Iremos utilizar redes profundas para um seletivo grupo de lisozimas provenientes da clara do ovo de galinhas (da sigla em inglês HEWL). Devido ao seu uso extensivo como modelo no estudo da cristalografia, nosso campo amostral de HEWL será de grande tamanho ($n > 300$ estruturas) e bem elucidado experimentalmente, possibilitando assim, a elaboração de um modelo assertivo.

Referências:

1 DRENTH, J. **Principles of protein X-ray crystallography**. New York: Springer, 2006. 2 RUPP, B. **Biomolecular crystallography** : principles, practice, and application to structural biology. New York: Garland Science, 2010. 3 GÉRON, A. **Hands-on machine learning with scikit-learn and tensorflow** : concepts, tools, and techniques to build intelligent systems. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2017.

IC53

Uma análise da termodinâmica quântica de um dipolo interagindo com um pulso de fóton único

NEVES, L. ; BRITO, F. B. D.

rodrigoneves@usp.br

Formular definições gerais para grandezas como calor, trabalho e entropia no contexto de sistemas quânticos abertos é um problema ainda sem solução. Estas são algumas das questões fundamentais circunscritas pela Termodinâmica Quântica, cujo principal interesse prático se encontra na compreensão e desenvolvimento de nanomáquinas. De maneira geral, este trabalho tem o propósito de inserir o aluno no estado da arte dessa área, por meio de um estudo dirigido e da reprodução de alguns resultados estabelecidos na literatura, além de tentar avançar com resultados recentes obtidos pelo grupo de pesquisa em que se insere o trabalho. Um dos maiores desafios da área atualmente diz respeito à descrição de sistemas quânticos fortemente acoplados a reservatórios fora do equilíbrio térmico. Para um caso tão geral, as definições de quantidades de interesse termodinâmico constituem matéria sobre a qual ainda não há consenso na comunidade. Neste trabalho, abordamos o problema de um dipolo quântico em interação com um pulso eletromagnético em estado de fóton único, correspondendo a um reservatório em estado não-térmico. O objetivo central é reproduzir e possivelmente estender os resultados das Referências (1) e (2), em que é feito o estudo da dinâmica reduzida do dipolo através de uma equação mestra não-perturbativa, bem como a caracterização das trocas energéticas com o ambiente (trabalho e calor).

Referências:

1 VALENTE, D.; BRITO, F. B. D.; WERLANG, T. Dynamic stark shift induced by a single photon packet. **Optics Letters** , v. 42, n. 9, p. 1692-1695, 2017. 2 VALENTE, D. *et al* . Work on quantum dipole by a single-photon pulse. **Optics Letters** , v. 43, n. 11, p. 2644-2647, 2018.

IC54

Physarum polycephalum: o bolor inteligente

POPULIM, M. S. ; FONTANARI, J. F.

matheusspopulim@usp.br

O objetivo deste trabalho é investigar a eficiência de algoritmos inspirados no comportamento forrageiro do plasmódio *Physarum polycephalum*, que consegue encontrar o caminho mais curto que liga vários pontos (fontes de alimento) num plano. O algoritmo do *Physarum* (1-2) modela o espaço como um grafo que representa a malha que transporta o material citoplasmático do organismo pelo plano. Considera-se o nó de origem como fonte e o nó de destino como sumidouro, ambos com fluxos opostos e constantes. Todos os nós intermediários têm capacidade nula. Assim, a cada iteração, a solução de um sistema de equações permite o cálculo dos fluxos entre nós baseado na condutividade, pressão e distância entre eles. O elemento importante do algoritmo é regulação dinâmica da condutividade entre os nós pelo fluxo de matéria que passa neles. A dependência não-linear entre essas grandezas leva a um estado de equilíbrio que, em alguns casos, corresponde à menor distância entre o nó de origem (fonte) e o nó de chegada (sumidouro). Essa formulação é adequada para tratar o problema do caminho mínimo entre dois pontos (PCM). Se quisermos o caminho mínimo que liga vários pontos, que corresponde ao problema da árvore geradora mínima (AGM), então a implementação do algoritmo requer que cubramos o plano com uma grid aleatória para possibilitar a representação do problema como um grafo e, a cada iteração, escolhamos aleatoriamente pares como fonte e sumidouro. Verificamos que, com uma escolha judiciosa dos parâmetros, o algoritmo converge para boas soluções em ambos os problemas. No entanto, o algoritmo é um método iterativo pouco eficiente comparado às soluções heurísticas conhecidas desses problemas. Observamos que o algoritmo converge rapidamente e produz uma boa solução para o PCM (labirinto). O mesmo vale para o problema da AGM, mas somente para uma pequena quantidade de nós.

Referências:

1 TERO, A.; KOBAYASHI, R.; NAKAGAKI, T. A mathematical model for adaptive transport network in path finding by true slime mold. **Journal of Theoretical Biology** , v. 244, n. 4, p. 553-564, 2007. 2 TERO, A. *et al* . Rules for biologically inspired adaptive network design. **Science** , v. 327, n. 5964, p. 439-442, 2010.

IC55

Desenvolvimento de software de controle para um microscópio óptico sem lentes.

FEITOSA, P. ; PRATAVIEIRA, S. ; D'ALMEIDA, C. D. P.

patrickof@usp.br

O desenvolvimento do microscópio permitiu um avanço enorme na ciência, viabilizando o descobrimento de um novo mundo, uma vez que foi possível enxergar estruturas invisíveis a olho nú. Atualmente, vemos que o seu uso estendeu-se para além da curiosidade particular e de interesses científicos, tornando-o ferramenta necessária para análise de microrganismos e diagnóstico de doenças. Além desse crescimento no campo de atuação, vemos uma evolução também na sua construção, passando de um instrumento com uma configuração robusta, possuindo um conjunto de lentes, para um sistema mais simples, sem a utilização de lentes. Dentre as configurações existentes desses microscópios sem lentes, trabalharemos com a *in-line* a qual é constituída por: um led, um *pinhole*, um sensor CMOS e um transladador.(1)Essa nova estrutura de microscópios sem lentes apresentam uma grande vantagem em comparação com o modelo tradicional; eles são capazes de desacoplar a relação entre o campo de visão e a capacidade de resolução do sistema.(2) Isso permite a obtenção de imagens com resolução de poucos micrômetros e com um campo de visão de algumas centenas de milímetros quadrados. No entanto, a obtenção das imagens por meio desse tipo de microscópio necessita de um processamento digital, uma vez que as imagens capturadas pelo sistema são hologramas obtidos pela interferência da luz que passa direto pela amostra e pela luz que difrata na mesma amostra. Uma das formas possíveis para se realizar esse processamento é por meio do método de multialturas. Esse método utiliza, para cada imagem processada, uma sequência de imagens da mesma amostra, adquiridas em diferentes distâncias entre a amostra e o sensor. Esse trabalho teve o intuito de promover a integração dos softwares utilizados atualmente, para realizar a aquisição desses hologramas. Na estrutura atual do microscópio, os dispositivos responsáveis pela captura das imagens: o sensor CMOS e o transladador, eram passíveis de serem controlados via linguagem de programação. Com isso, por meio do Python essa integração foi feita, utilizando bibliotecas e softwares disponibilizados pelos fabricantes. Além dessa integração, foi possível desenvolver um interface via *Prompt de Comando*, a qual permitiu uma melhor usabilidade do sistema, viabilizando a utilização do sistema por usuários não familiarizados com os detalhes do seu funcionamento.

Referências:

- 1 D'ALMEIDA, C. D. P. **Desenvolvimento e caracterização de um microscópio óptico holográfico sem lentes in-line** . Orientador: Sebastiao Pratavieira..2018.76p.Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2018. 2 MCLEOD, E.; OZCAN, A. Unconventional methods of imaging: computational microscopy and compact implementations. *Reports on Progress in Physics* , v.79, n.7, p.076001.2016.

IC56

Produção de complexos de septinas de *Ciona intestinalis*

STROZI, H. ; ARAUJO, A.

heitor.strozi@usp.br

As septinas são proteínas do citoesqueleto que ligam GTP, conservadas em todos os animais e fungos, que se agrupam em complexos hetero-oligoméricos que podem se polimerizar em filamentos e estes assumirem estruturas de maior complexidades como anéis e redes. Suas funções celulares são determinantes para eventos como a citocinese entre muitos outros que dependem de remodelamento de membranas.(1) Em humanos, os 13 genes que codificam quatro subgrupos de septinas, que se combinam para formarem os hetero-filamentos.(2) Apesar da importância dessas proteínas, seu mecanismo de ação molecular ainda não é bem compreendido. Buscando um modelo mais simples para esclarecer esse mecanismo, as quatro septinas de *Ciona intestinalis*, um organismo modelo considerado basal aos vertebrados, foram escolhidas como objeto de estudos. Assim, o conjunto de septinas de *C. intestinalis* pode ser encarado como um modelo de estudo minimalista, porém completo, para entender como se dá a organização dos complexos e filamentos.(3) As construções para expressão heteróloga das septinas de *C. intestinalis* idealizadas durante o doutoramento da Sinara T. do Brasil Morais. Neste trabalho as septinas foram expressas ou co-expressas de formas diferentes para a produção e montagem dos complexos CiSEPT2/6/7, CiSEPT6/7/9 e CiSEPT2/6/7/9. Estes complexos foram purificados por cromatografia de afinidade, seguida por cromatografia por tamanho (SEC) e utilizadas em experimentos de cristalização e de avaliação do estado oligomérico através de SEC-MALS. Para o complexo 2/6/7/9 foram identificadas 2 massas diferentes: 466 kDa ($\pm 0.045\%$) e 324 kDa ($\pm 0.016\%$), além de um pico de menor massa. Para o complexo 6/7/9 foram observadas 2 massas: 225,2 kDa ($\pm 0,015\%$) e 183,5 kDa ($\pm 0,032\%$). Assim, a análise do complexo CiSEPT2/6/7/9 mostrou uma fração majoritária correspondente a um octômero, mas o heterocomplexo 6/7/9 mostrou-se mais heterogêneo, com praticamente 50% de sua fração composta apenas por 7/9. Os ensaios de cristalização levaram a formação de cristais do complexo 2/6/7/9. Porém, a baixíssima resolução da difração impediu a resolução de sua estrutura. Tais resultados permitirão o refinamento da condição na qual o cristal 2/6/79 foi obtido e a continuidade da sua caracterização.

Referências:

1 VALADARES, N.F. *et al* . Septin structure and filament assembly. **Biophysical Reviews** , v.9, n.5, 481–500, 2017. 2 KINOSHITA, M. Assembly of mammalian septins. **Journal of Biochemistry** , v. 134, n. 4, p. 491-496, 2003. 3 MORAIS, S. T. B. **Septinas de *Ciona intestinalis*** : estudos voltados à formação de heterocomplexos. 2019. Tese (Doutorado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

IC57

Triagem *in vitro* de compostos ativos frente linhagem celular de câncer de mama triplo-negativa e metastática

COSTA, F. R. F. D. ; SOUZA, M. S. ; ANDRICOPULO, A. D.

feliperfc@estudante.ufscar.br

Câncer é a denominação conferida a um grupo de mais de cem doenças caracterizadas pelo crescimento e proliferação desordenados de células capazes de adentrar e migrar por diversos tecidos e órgãos. Relatórios da Organização Mundial da Saúde (OMS) sinalizam que o mundo registrará um crescimento global de 60 % dos casos de câncer, contabilizando algo entre 29 e 37 milhões até 2040. No Brasil, dados do Instituto Nacional de Câncer (INCA) estimam que mais de 66 mil novos casos de câncer de mama sejam registrados em 2020, correspondendo a aproximadamente 30 % das ocorrências de todas as neoplasias malignas. (1) A remoção de tumores localizados não configura-se efetiva nos casos envolvendo tumores metastáticos, que necessitam da administração de quimioterápicos. O processo denominado de metástase consiste no comportamento mais ofensivo do câncer, sendo responsável por 90 % dos casos que levam os indivíduos a óbito. Sua principal característica constitui na capacidade de células anormais se dissociarem do tumor inicial e de invadirem e migrarem por diferentes regiões, originando tumores secundários. Apesar de ampla, a quimioterapia disponível conta com tratamentos de alta toxicidade, provocando efeitos colaterais agressivos aos pacientes. Essa situação decorre, sobretudo, da complexidade de diferenciação entre células saudáveis e tumorais, resistência e limitada biodisponibilidade. Nesse contexto, o presente trabalho de Iniciação Científica (IC) visou a realização de uma triagem biológica para identificação de novas moléculas com propriedades antitumorais eficientes e mais seguras como opções aos vigentes tratamentos para o câncer de mama. (2) Por conseguinte, 2 séries sintéticas provenientes das classes das indolizinas e naftiridinas foram analisadas por meio de ensaios *in vitro* de citotoxicidade em linhagem de câncer de mama (MDA-MB-231) e posterior avaliação da seletividade frente fibroblastos humanos saudáveis (HFF-1). Os compostos-teste foram desenhados levando-se em consideração a interação da colchicina no sítio ativo da proteína tubulina, um alvo molecular descrito na literatura de grande relevância para o tratamento antitumoral. A verificação da viabilidade celular foi realizada pelo ensaio colorimétrico baseado na redução do composto resazurina na fluorescente resorufina em células viáveis (emissão = 588 nm). Os valores de IC50 foram determinados através de regressão não-linear de melhor ajuste utilizando o software *GraphPad Prism 8*. Doxorrubicina e colchicina foram utilizados como controles. Os resultados apontam que o composto 41 foi capaz de inviabilizar de forma seletiva a linhagem triplo-negativa e metastática frente fibroblastos saudáveis; com um índice de seletividade de aproximadamente 40. Ele é promissor para prosseguir para os ensaios de migração e modulação do alvo. Os demais resultados foram interessantes uma vez que poderão auxiliar no planejamento de novas modificações químicas visando relacionar estrutura-atividade. (3) Motivado pelos valores de IC50 em células tumorais e saudáveis, serão necessárias novas sínteses para obtenção de novas moléculas com um comportamento semelhante ao composto 41. Dessa forma, este trabalho possibilitou a avaliação inicial de propriedades desejáveis à candidatos a novos fármacos para o tratamento de câncer de mama: pronunciada potência frente às células cancerígenas e elevada seletividade.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Cancer tomorrow** : a tool that predicts the future cancer incidence and mortality burden worldwide from the current estimates in 2018 up until 2040. 2020. Dis-

ponível em: <https://gco.iarc.fr/tomorrow/home>. Acesso em: 20 set. 2020. 2 LEE, A.; DJAMGOZ, M. B. A. Triple negative breast cancer: emerging therapeutic modalities and novel combination therapies. **Cancer Treatment Reviews** , v. 62, p. 110-122, 2018. DOI: 10.1016/j.ctrv.2017.11.003. 3 DEVI TANGUTUR, A. *et al* . Microtubule targeting agents as cancer chemotherapeutics: an overview of molecular hybrids as stabilizing and destabilizing agents. **Current Topics in Medicinal Chemistry** , v. 17, n. 22, p. 2523-2537, 2017.

IC58

Efeito do tempo de moagem sobre a estrutura e microestrutura de BaCO₃

ANDRADE, B. R. V. D. ; CLABEL, J. L. ; MAREGA, E.

bruna.robledo13@usp.br

O carbonato de bário (BaCO₃) é um pó-cerâmico com ampla aplicação industrial, desde a área da engenharia até a área da saúde (1), sendo também utilizado na produção de supercondutores e materiais cerâmicos. (2) O foco desta pesquisa é investigar a influência do tempo de moagem na mudança estrutural e morfologia microestrutural dos pós-cerâmicos BaCO₃, além de analisar a absorção de grupos funcionais e reações intermediárias do propanol-2 na superfície da partícula BaCO₃, visando estudar os defeitos e otimizar suas propriedades funcionais com melhor eficiência. O pó-cerâmico BaCO₃ foi sintetizado pelo método convencional de reação de estado sólido (RES). Foram misturados pós-cerâmicos BaCO₃ (99.98%) adquiridos da Sigma Aldrich, e propanol-2 (99.5%) adquiridos de Synth, este último usado como solvente. A análise estrutural foi realizada mediante difração de raios-X em um difratômetro Rigaku Dmax 2500PC de radiação CuK em uma faixa angular entre 10° e 75° com 2° min⁻¹ de velocidade de varredura e passo de 0,02°. As medidas de infravermelho (IR) foram realizadas em um espectrômetro Nicolet Nexus 470. Os espectros foram registrados na faixa de 4000 a 400cm⁻¹ com resolução de 4cm⁻¹. No espectro FTIR, quatro bandas de absorção principais que são características da vibração no ânion carbonato (CO₃²⁻) isolado por Ba²⁺ são observadas e podem ser identificadas pelas bandas em 1427, 1059, 857 e 693 cm⁻¹. O primeiro pico é o mais intenso e está associado com as vibrações de alongamento assimétrico e simétrico das vibrações de ligação C-O. A esquerda deste, os demais picos, que são menores, indicam as vibrações de flexão dentro e fora do plano de O-C-O do CO₃²⁻. O pico próximo a 1700cm⁻¹ representa as vibrações de alongamento da ligação C=O, enquanto a protuberância perto de 3400cm⁻¹ está relacionada ao O-H da molécula de água absorvida na superfície da partícula devido a sítios ativos presente. Todos os picos, após 48h de moagem, ficaram mais estreitos e perderam parte da intensidade. Por meio de MEV foi possível identificar uma mudança no tamanho médio da partícula de 20 para 2 μm, este decresce com o tempo de moagem. Os resultados por DRX revelam uma variação no tamanho de cristalito de 78 para 61 nm. A influência do tempo de moagem na estrutura de BaCO₃ foi confirmada onde a presença de grupos funcionais C-H corresponde à absorção não-dissociativa de propanol-2.

Referências:

1 AKBAS, H. Z. **Process control using FT-IR analysis of BaTiO₃ from ultrasonically activated BaCO₃ And TiO₂** . *In* : INTERNATIONAL MEDITERRANEAN SCIENCE AND ENGINEERING CONGRESS, 2016, ADANA, 2016. DOI: 10.13140/RG.2.2.35422.64325. 2 SABET, M.; SALAVATI-NIASARI, M.; FARD, Z. A. Synthesis and characterization of barium carbonate nanostructures via simple hydrothermal method. **Inorganic and Nano-Metal Chemistry** , v. 46, n. 3, p. 317–322, 2015.

PG1

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

FONTOLAN, L. S. B. ; THIEMANN, O. H.

laure@usp.br

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. 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. (1) The prototype developed will be capable of monitoring and adjusting bacterial culture conditions such as temperature, pH, oxygenation, and cell growth (A600) of a customized number of small volume samples. (2) The programmed addition of reactants will be performed by the device, providing the user with an option to slightly change the original experiment's 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. 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.

Referências:

1 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, Sept. 2013. 2 DUETZ, W. A. Microtiter plates as mini-bioreactors: miniaturization of fermentation methods. **Trends in Microbiology** , v. 15, n. 10, p. 469-475, Oct. 2007.

PG2

Correlações quânticas no modelo DQC1

GOETTEMS, E. I. ; DUZZIONI, E. I. ; MACIEL, T. O.

elisagtt@ifsc.usp.br

O modelo de computação quântica determinística com um qubit (DQC1) é um modelo restrito de computação quântica capaz de calcular com eficiência o traço normalizado de uma matriz unitária.(1) Neste trabalho analisamos as correlações quânticas denominadas emaranhamento (2), não localidade de Bell (3), discórdia quântica e coerência gerada pelo circuito DQC1 considerando apenas dois qubits (auxiliar e controle). Para o modelo DQC1 padrão, apenas a discórdia quântica e a coerência aparecem. Ao introduzir um filtro no circuito, purificamos o qubit auxiliar retirando-o do estado totalmente misturado e, conseqüentemente, promovendo outras correlações quânticas entre os qubits, como o emaranhamento e a não localidade de Bell. Através da otimização do processo de purificação, concluímos que mesmo uma pequena purificação é suficiente para gerar emaranhamento e não localidade de Bell.

Referências:

1 KNILL, E.; LAFLAMME, R. Power of one bit of quantum information. **Physical Review Letters** , v. 81, n. 25, p. 5672-5675, Dec. 1998. 2 VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. **Physical Review A** , v. 65, n. 3, p. 032314-1-032314-11, Feb. 2002. 3 HORODECKI, R.; HORODECKI, P.; HORODECKI, M. Violating Bell inequality by mixed states: necessary and sufficient condition. **Physics Letters A** , v. 200, n. 5, p. 340-344, May 1995.

PG3

Electromagnetically induced transparency in Rydberg atoms using Laguerre-Gaussian beams

GOMES, N. D. ; MARCASSA, L. G.

naomy.gomes@usp.br

Electromagnetically induced transparency (1) is a quantum interference phenomenon studied in three-level systems, where the absorption/transmission in the medium of a resonant and weak probe field can be modified by introducing a strong control field, being both of them connected by a common state. It was first observed in 1991 in strontium vapor.(2) Its importance in terms of applications relies, among others, on quantum memory, quantum information processing, and reduction of the speed of light (slow-light). In this work, we investigate theoretically the EIT phenomenon in Rydberg atoms of a three-level ladder system of rubidium 87, using as a control field a Laguerre-Gaussian (LG) beam. The probe light couples the $5S_{1/2} \rightarrow 5P_{3/2}$ transition at 780 nm, and the control light in the LG mode couples the $5P_{3/2} \rightarrow nD$ transition at 480 nm. The LG beam, having the shape of a donut, presents a dependence on the radial coordinate and an azimuthal charge l . We show that the intensity profile of this mode alters the absorption/transmission spectrum of the probe beam when compared to a control field in a Gaussian mode, presenting a narrower absorption/transmission spectrum, which also depends on the azimuthal charge.

Referências:

1 FLEISCHHAUER, M. ; IMAMOGLU, A.; MARANGOS, J. Electromagnetically induced transparency: optics in coherent media, **Review of Modern Physics** ,v. 77, n.2, p.633–673, 2005. 2 BOLLER, K. J.;IMAMOGLU, A.;HARRIS, S. E. Observation of electromagnetically induced transparency, **Physical Review Letters** ,v. 66, n.20, p.2593–2596, 1991.

PG4

Estudo do transporte misto em transistores eletroquímicos orgânicos de PEDOT:PSS

COLUCCI, R. ; FARIA, G. ; GONÇALVES, R.

rcolucci@usp.br

Um dos grandes diferenciais dos materiais semicondutores orgânicos é sua habilidade de suportar, em determinadas condições, transporte eletrônico e iônico simultâneo. Tal habilidade possibilitou tais condutores mistos a serem aplicados como dispositivos de interesse biológico. Um exemplo é o transistor orgânico eletroquímico (OECT). Esse dispositivo é formado por uma camada semicondutora, delimitada por dois eletrodos (fonte e dreno), que forma o canal do transistor e está em contato com uma solução eletrolítica, que contém um eletrodo denominado porta. Durante a operação, aplica-se uma tensão no eletrodo porta, o que induz troca iônica entre o polímero e o eletrólito, que é compensada através da injeção/extração de cargas a partir dos eletrodos dreno e fonte. Isto altera o estado de dopagem do canal, levando a uma mudança na corrente extraída entre fonte-dreno.(1) Um dos principais pontos de interesse é o de aprimorar o desempenho destes dispositivos, a partir da compreensão das propriedades fundamentais do material do canal, e como ele se comporta na presença de diferentes íons. Para tal estudo, foram confeccionados OECTs com poli(3,4-etileno dioxitiofeno):poliestireno sulfonado (PEDOT:PSS) como camada ativa. A resposta elétrica e morfológica dos OECTs foi caracterizada utilizando diversos eletrólitos aquosos, com concentração de 100 mM, a saber: NH_4Cl , KCl , NaCl , CaCl_2 e MgCl_2 . Os resultados demonstram que íons com menor raio iônico e maior esfera de hidratação resultam em dispositivos com maior fator de mérito, que é definido pelo produto da mobilidade eletrônica e capacitância volumétrica (μC^*). Observamos ainda, que a mobilidade eletrônica se mantém constante para todos os íons. Por outro lado, a capacitância volumétrica aumenta em 25% quando comparamos as espécies iônicas NH_4Cl e MgCl_2 . Uma vez que filmes de PEDOT:PSS absorvem água, já que são hidrofílicos, analisamos a diferença entre a quantidade de água absorvida para as diferentes espécies iônicas. Os resultados demonstram que a quantidade de água cresce seguindo a mesma ordem do fator de mérito e este aumento é de aproximadamente 100% quando comparamos os resultados extremos. Além disso, realizamos um estudo da capacitância volumétrica em função da espessura do filme, com o intuito de avaliar a influência da espécie iônica na sua profundidade de penetração no volume do filme polimérico. Observamos que a capacitância volumétrica decai para espessuras superiores a 800 nm quando utilizamos KCl e superiores a 1000 nm para MgCl_2 . Através da medida de espectroscopia de fotoelétrons excitados por raio X (XPS) de perfil de profundidade comprovamos que poucos íons atingem profundidades maiores que 800 nm. Deste modo, nossos resultados demonstram que a natureza da espécie iônica tem impacto importante no desempenho dos dispositivos. Concluímos propondo diretrizes para a fabricação de OECTs com desempenho otimizado.

Referências:

1 COLUCCI, Renan, *et al* . Recent advances in modeling organic electrochemical transistors. **Flexible and Printed Electronics** , v.5, n.1, p.013001,2020..

PG5

Um estudo da absorção de dois fótons e das propriedades fotofísicas em compostos derivados de imidazo[4,5-b]pyridine

PELOSI, A. ; COCCA, L. Z. ; ABEGAO, L. ; MENDONCA, C.

andre.gasparotto.pelosi@usp.br

Desde o advento do laser em 1960 por Theodore H. Maiman, a caracterização das propriedades ópticas não-lineares dos materiais tornou-se fundamental para o desenvolvimento de novas tecnologias, tornando a área de espectroscopia não-linear indispensável para avanços tecnológicos na área de fotônica. Dentre os materiais que se destacam como promissores para o desenvolvimento de dispositivos fotônicos, os materiais orgânicos são bons candidatos pois podem apresentar altos coeficientes ópticos não-lineares, fácil síntese, baixo custo de produção e propriedades fotofísicas e fotoquímicas que permitem serem usadas como bioprobes, por exemplo. Uma importante classe de materiais orgânicos são as imidazopiridinas, visto que podem ser empregadas em áreas como química medicinal, ciência dos materiais e na indústria farmacêutica. (1) A estrutura das imidazopiridinas consiste na fusão de um anel piridínico com um anel imidazol. Porém, a posição e o número de nitrogênio presentes na estrutura principal das imidazopiridinas podem variar, dando origem a quatro possíveis cores: imidazo[1,2-a]pyridine, imidazo[4,5-a]pyridine, imidazo[4,5-b]pyridine, imidazo[4,5-c]pyridine. A imidazo[4,5-b]pyridine, material estudado neste trabalho, é amplamente utilizada para aplicações biológicas, tendo seu core presente em moléculas orgânicas utilizadas em tratamentos de algumas doenças como o câncer, doenças neurodegenerativas, diabetes e hipertensão. Além disso, o core de imidazo[4,5-b]pyridine tem sido usado na área de espectroscopia de DNA e RNA por apresentar boas propriedades de fluorescência e ser isóstera (semelhanças nas propriedades eletrônicas) da molécula de purina, permitindo assim a utilização desses materiais como bioprobes para análises estruturais locais desses ácidos nucleicos. (2) Com o avanço da engenharia molecular é possível que estruturas periféricas possam ser incorporadas ao core da imidazo[4,5-b]pyridine, possibilitando modelar as respostas ópticas lineares e não-lineares e, conseqüentemente, potencializar o desempenho destes compostos para futuras aplicações fotônicas. Visto isso, técnicas de espectroscopia linear e não-linear foram empregadas em seis compostos de imidazo[4,5-b]pyridine com diferentes estruturas periféricas. Das técnicas de espectroscopia linear foi possível determinar propriedades como: bandas de absorção linear, espectro de emissão, tempo de vida de fluorescência e eficiência quântica de fluorescência. Com o emprego de técnicas de espectroscopia não-linear como a técnica de varredura-Z (do inglês Z-Scan) e a Técnica de bombeio e prova (do inglês Pump-Probe) foi possível medir o coeficiente de absorção não linear e a absorção dos estados eletrônicos excitados, respectivamente. Assim, esse trabalho de Mestrado tem como objetivo o estudo das propriedades de seis compostos de imidazo[4,5-b]pyridine, com diferentes grupos periféricos incorporados, por meio de técnicas de espectroscopia linear e não-linear, possibilitando então o entendimento de como alterações na estrutura do core da imidazo[4,5-b]pyridine podem afetar as propriedades desse composto, e com isso aperfeiçoar o direcionamento tecnológico desses materiais.

Referências:

1 ROOPAN, S. M.; PATIL, S. M.; PALANIRAJA, J. Recent synthetic scenario on imidazo[1,2-a]pyridines chemical intermediate. **Research on Chemical Intermediates**, v. 42, n. 4, p. 2749-2790, 2016. doi: 10.1007/s11164-015-2216-x. 2 BALADI, A.; GRANZHAN, S. Piguel microwave-assisted C-2 direct alkenylation of imidazo[4,5-b]pyridines: access to fluorescent purine isosteres with remarkably large Stokes shifts; **European Journal of Organic Chemistry**, v. 2016, n. 14, p. 2421-2434, 2016. doi:

10.1002/ejoc.201600166.

PG6

Anderson localization of light in dimension $d - 1$

MÁXIMO, C. E. ; MOREIRA, N. A. ; KAISER, R. ; BACHELARD, R.

dumax1@gmail.com

A wave scattering inside a disordered medium may suffer destructive self-interference, as the scattering modes become exponentially localized. As a consequence, the transport is put to a halt, a phenomenon known as Anderson Localization. Localization is heavily dependent on the system dimensionality: One and two-dimensional systems localize in presence of an arbitrary disorder, whereas three-dimensional ones are expected to localize only above a critical disorder. Despite the success of this universal theory (1), in the special case of electromagnetic waves, polarization terms (a feature of the vectorial nature of these waves) prevents localization (2), and only light scattering systems of dimensions $d=1$ and 2 with scalar scattering channels exhibit light localization. These results were established for the thermodynamic limit, when the system size grows to infinity. In this work we have studied finite-size effects and discussed the presence of surface modes in vectorial systems of dimensions $d=2$ and 3, simulating clouds of point-like scatterers (such as atoms) in a regime where localization should not exist. We report on localization features along the surface of the cloud, with 3D (2D) systems exhibiting surface localized modes with scaling consistent to 2D (1D) theory. Therefore, finite-size effects, which are in general expected to hinder localization, can actually promote their appearance in systems not expected to localize.

Referências:

1 ABRAHAMS, E. *et al* . Scaling theory of localization: absence of quantum diffusion in two dimensions. **Physical Review Letters** , v. 42, n. 10, p. 673-676, 1979. 2 MÁXIMO, C. E. *et al* . Spatial and temporal localization of light in two dimensions. **Physical Review A** , v. 92, n. 6, p. 062702-1-062702-7, 2015.

PG7

Ultrafast excited state dynamics of Zn(II), Cu(II) and Co(II) metalloporphyrins

SCIUTI, L. ; COCCA, L. Z. ; BONI, L. D.

lfsciuti@gmail.com

Metalloporphyrins are well known porphyrin molecules with a metal ion inserted in their inner core through functionalization. Different metal ions will significantly change the photophysical and photochemical properties of the molecule. For instance, metalloporphyrins can be employed in all-optical switching and optical power limiting (1) using the strong reverse saturable absorption (RSA) capacity of those molecules. Chemically modified electrodes with Co(II) or Cu(II) metalloporphyrins provided stable and efficient electrocatalytic systems for the hydrogen evolution reaction. (2) Photodynamic therapy (PDT) is another successful application of porphyrins with high intersystem crossing rate. (3) The diverse electronic transitions times and yields will make a metalloporphyrin interesting to a particular technological application, therefore, the characterization of those electronic states transitions of a molecule are the basis to achieving such an application. In order to aim that, it was used various ultrafast experimental techniques to determine different photophysical properties. Z-Scan using a white light as radiation source provided the excited state absorption cross-section spectrum, pulse train fluorescence revealed the intersystem crossing rate and white light transient absorption determined the internal conversion rate and allows the calculation of the excited state absorption spectrum to confirm the one obtained through Z-Scan method. Linear spectroscopy experiments were also performed to evaluate fluorescence lifetime and quantum yield and the linear absorption cross-section. In this work, it was performed the characterization of the free base porphyrin (2HPor) and three metalloporphyrins which the only difference between them are the metal ion, specifically, zinc (Zn(II)Por), copper (Cu(II)Por) and cobalt (Co(II)Por). All molecules were studied dissolved in dimethylsulfoxide (DMSO). The results showed that the number of Q-bands in the linear absorption spectrum depends on the metal ion. Zn, Cu and Co have three, two and one band, respectively. The free base and Zn(II)Por are fluorescence with low fluorescent quantum yield (<5%) and they have high intersystem crossing rate (80%) which indicates they are good candidates to photodynamic therapy (PDT). White light Z-Scan demonstrated that from 450 nm to 500 nm, both 2HPor and Zn(II)Por have an excited state absorption cross-section larger than the ground state one, indicating the samples as good candidates for optical limiting or saturable absorbers in this spectral range. Cu(II)Por and Co(II)Por have the internal conversion as their main excited state decay mechanism. Transient absorption showed the Co(II)Por decays from the excited state to the ground state much faster (1 ps) than the Cu(II)Por (25 ps).

Referências:

1 KIRAN, P. P. *et al.* Enhanced optical limiting and nonlinear absorption properties of azoarene-appended phosphorus (V) tetratolylporphyrins. **Applied Optics**, v. 41, n. 36, p. 7631-7636, Dec. 2002. 2 CANALES, C. *et al.* Enhanced electrocatalytic hydrogen evolution reaction: Supramolecular assemblies of metalloporphyrins on glassy carbon electrodes. **Applied Catalysis B: environmental**, v. 188, p. 169-176, July 2016. 3 ETHIRAJAN, M. *et al.* The role of porphyrin chemistry in tumor imaging and photodynamic therapy. **Chemical Society Reviews**, v. 40, n. 1, p. 340-362, Dec. 2011.

PG8

Otimização de atividades anti-biofilmes utilizando esterases de *Bacillus licheniformis*

LEITE, A. E. T. ; POLIKARPOV, I.

anatognoli@ifsc.usp.br

Biofilmes bacterianos são formados por organismos unicelulares que assumem temporariamente um estilo de vida multicelular onde passam a viver dentro de uma matriz polimérica hidratada produzida pelas próprias bactérias para sua própria proteção. (1) Esses biofilmes bacterianos são fontes de muitas infecções e contaminações em sistemas médicos onde de 65 a 80% das infecções bacterianas humanas estão relacionadas a esses biofilmes. (2) Alguns exemplos dessas infecções bacterianas com biofilme são a contaminação de lentes de contato causadas por *P. aeruginosa*, contaminação de dentaduras e cateteres urinários por *Candida spp* e contaminação em cateteres venosos centrais, válvula cardíaca mecânica e próteses artificiais de quadril por *S. aureus*. (3) Diversos estudos mostram diferentes formas da remoção desses biofilmes com a utilização de biocidas, desinfetantes e enzimas de origens fúngicas ou bacterianas. Nesse estudo foram utilizadas duas esterases (BIEstA e BIEstB) de *Bacillus licheniformis* previamente caracterizadas para uma possível remoção e prevenção de biofilme bacteriano de *S. aureus*. Os ensaios foram realizados em diferentes tempos e concentrações enzimáticas, além de um estudo com a aplicação dessas enzimas juntamente com antibiótico para analisar uma possível melhora em sua ação. As enzimas BIEstA e BIEstB foram eficientes em ambas as aplicações atingindo um máximo de eliminação do biofilme em 80 % para a BIEstA e 75% para a BIEstB. Devido a essa eliminação, as esterases atuam também na melhora da ação do antibiótico com uma maior morte celular das bactérias nos biofilmes que foram tratados com maiores quantidades de enzimas. Com esses resultados podemos dizer que as enzimas BIEstA e BIEstB auxiliam na remoção e prevenção de biofilmes bacterianos, tornando possível, futuramente, uma possível aplicação para que ocorra uma menor taxa de contaminação e infecção devido a biofilmes.

Referências:

1 JAMAL, M. *et al* . Bacterial biofilm and associated infections. **Journal of the Chinese Medical Association** , v. 81, n. 1, p. 7-11, Jan. 2018. 2 CHAIGON, P. *et al* . Susceptibility of staphylococcal biofilms to enzymatic treatments depends on their chemical composition. **Applied Microbiology Biotechnology** , v. 75, n. 1, p. 125-132, May 2007. 3 THALLINGER, B. *et al* . Antimicrobial enzymes[U+202F]: an emerging strategy to fight microbes and microbial biofilms. **Biotechnology Journal** , v. 8, n. 1, p. 97-109, Jan. 2013.

PG9

Purines bases analogs: a linear and nonlinear spectroscopic characterization aiming applications as emergent fluorescence bioprobes for studies at DNA and RNA molecules

COCCA, L. Z. ; ABEGAO, L. ; SCIUTI, L. ; MENDONCA, C. ; BONI, L. D.

leandro.cocca@yahoo.com.br

Linear and nonlinear spectroscopies studies at DNA and RNA molecules has been increase at lasts years. In this way, several kinds of organic molecules, that presents considerable emissive characteristics, have been synthetized to facility and improve these studies. Among such molecules, we can highlight the purines bases analog. Purines molecules are the nucleobases of DNA and RNA and different kinds of purines molecules can be synthetized (and are called purines bases analog) and modulated aiming the improvement of its optical properties, for example, the emission properties. Purines bases analog have been studied and characterized in last years for DNA and RNA spectroscopies studies, besides that, these molecules tend to show great emission properties as, considerable Stokes-shift and high fluorescence quantum yields, fact that makes these compounds good candidates as fluorescents bioprobes at fluorescence microscopy. In this work, aiming the employment of purines bases analog as fluorescence bioprobes, we characterized, using linear and nonlinear spectroscopic techniques, nine push-pull 6-amino-8-styryl purines bases analog. (1) Here, we determined through linear spectroscopy the one photon absorption spectra (1PA), the fluorescence quantum yield (ϕ_f) and the fluorescence anisotropy (r), we also determined the fluorescence lifetimes (τ_f) using the well-known time-resolved fluorescence technique. We performed solvatochromic measures for determination of difference between the excited and fundamental state permanent electric dipole moments ($[\mu]_{01}$), besides that, we also determined transition dipole moments (μ). Furthermore, through nonlinear spectroscopy, we determined, using Z-Scan (2) technique, the two photon absorption (2PA) cross section spectra (${}_2PA()$) and we use sum over states model (SOS) to fitting these 2PA spectra and improve the analysis of the results. The determination of 2PA cross sections spectra is very important aiming the purines bases analogs at applications previously mentioned, because 2PA presents great advantages over 1PA, for example, high spatial location and great penetrability at the therapeutic window (around 700 - 1000 nm). Lastly, we determined the transient absorption, through pump-probe technique, for excited states determination. The results shows that these molecules present 2PA peak in double of 1PA, around 750 nm (region that covers the therapeutic window), furthermore, these purines bases analog have employment capacity as fluorescence bioprobes at fluorescence microscopy by 1PA and 2PA.

Referências:

1 VABRE, R.; LEGRAVEREND, M.; PIGUEL, S. Synthesis and evaluation of spectroscopic properties of newly synthesized push-pull 6-amino-8-styryl purines. **Dyes and Pigments** , v. 105, p. 145-151, June 2014. 2 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, Apr. 1990.

PG10

Caminhos mínimos em redes complexas: Estrutura e otimização

COMIN, C. H. ; DOMINGUES, G. S. ; COSTA, L. D. F.

Dentre as várias propriedades topológicas de redes complexas,(1) o caminho mínimo representa uma característica particularmente importante devido ao seu potencial efeito em vários processos dinâmicos. Além disso, várias situações práticas, como o tráfego de veículos nas cidades, por exemplo, podem se beneficiar da redução dos respectivos caminhos mínimos nos sistemas relacionados.(2) No presente trabalho, abordamos o problema de tentar reduzir o mínimo caminho médio de várias redes complexas teóricas e uma do mundo real, adicionando um determinado número de arestas de acordo com diferentes estratégias.(3) Mais especificamente, consideramos: colocar novas arestas entre vértices com grau, centralidade de intermediação, centralidade de proximidade e acessibilidade relativamente baixo/baixo, baixo/alto e alto/alto; melhorar a regularidade de grau da rede; e ligação preferencial de acordo com o grau, bem como a escola aleatória de arestas, para comparação. Vários resultados interessantes foram obtidos, incluindo a identificação de estratégias baseadas em conectar vértices com valores máximos e mínimos de uma medida como a maior redução do comprimento do mínimo caminho médio. Outra descoberta interessante é que, para vários tipos de redes, os métodos baseados em graus tendem a fornecer melhorias comparáveis àquelas obtidas pelo uso de uma medida muito mais dispendiosa computacionalmente que é a centralidade de intermediação.

Referências:

1 ALBERT, R.; BARABASI, A.-L. Statistical mechanics of complex networks, **Reviews of Modern Physics**, v. 74, n. 1, p. 47, 2002. 2 AHUJA, R. K.; MAGNANTI, T. L.; ORLIN, J. B.; REDDY, M. Applications of network optimization, *In*: AHUJA, R. K. *et al*, **Handbooks in operations research and management science**. New York: Elsevier, 1995, v.7, p. 1–83. 3 PAIVA, W. R.; MARTINS, P. S.; DE ANGELIS, A. F. Unsupervised strategies to network topology reconfiguration optimization with limited link addition. *In*: BARBOSA, A. *et al*. **Complex networks**. New York: Elsevier, 2020. v.9, p. 51–59.

PG11

Algoritmos de aprendizagem de máquina aplicados a espectros Raman para a identificação de minérios de ferro

QUEIROZ, A. A. A. E. D. ; ANDRADE, M. B. D.

alfredo.queiroz@usp.br

Dados da Secretaria de Comércio Exterior (SECEX) do Ministério da Economia indicam que a demanda por minério de ferro brasileiro por siderúrgicas internacionais, em particular China e EUA, tem sido significativamente elevada. Em junho de 2020, mesmo com a pandemia do COVID-19; as exportações atingiram o total de 30,05 milhões de toneladas e representam uma receita de US\$ 1,88 bilhão (cerca de 9,4 bilhões de reais) com um crescimento de 1,3% em comparação a junho de 2019. A empresa Vale, em seu evento “Vale day” em Nova York (EUA), previu uma produção de minério de ferro entre 375 milhões e 395 milhões de toneladas no ano de 2021.(1) Este aumento em demanda, além de incentivar a produção das minas atuais, tem também incentivado uma grande competição entre as mineradoras para a identificação de novos depósitos de minério de ferro. O desenvolvimento de técnicas de caracterização rápida e detalhada de minerais de minério de ferro como magnetita, hematita, goethita entre outros; envolve uma complexidade inerente à existência de estruturas polimórficas nesses minérios.(2) Assim, a hematita ($\alpha - Fe_2O_3$) e a maghemita ($(Fe_{0.67}^{3+} \square_{0.33})Fe_2^{3+}O_4$) possuem a mesma fórmula química, mas se cristalizam em diferentes estruturas e podem ser diferenciadas por difração de raios X (DRX). Por outro lado, a magnetita ($Fe^{2+}Fe_2^{3+}O_4$) possui a mesma estrutura cristalina da maghemita ($(Fe_{0.67}^{3+} \square_{0.33})Fe_2^{3+}O_4$) e suas estruturas não podem ser diferenciadas pela técnica DRX. Os óxidos de ferro possuem vários modos vibracionais ativos Raman. A espectroscopia Raman é particularmente sensível tanto aos aspectos estruturais quanto aos químicos dessas espécies minerais, sendo adequada para a caracterização e diferenciação das estruturas polimórficas existentes nos minérios de ferro. Este trabalho apresenta os espectros Raman coletados durante o processo de caracterização das fases minerais portadoras de ferro natural incluindo os óxidos (hematita, magnetita) e hidróxidos (goethita), encontrados na região de $100 - 1400cm^{-1}$. A difração de raios X (XRD) será conduzida para verificar a pureza das fases e comparada com as análises Raman associadas. Neste trabalho, o tratamento computacional de espectros Raman é descrito com o objetivo de encontrar diferenças espectrais para espécimes de hematita, magnetita e goethita de modo a se auxiliar na identificação da origem do minério de ferro. Além disso, algoritmos classificadores de redes neurais foram desenvolvidos para a identificação dos números de onda observados nos espectros Raman com o propósito de se relacionar as diferenças químicas ou minerais estruturais. A espectroscopia Raman associada ao aprendizado de máquina é uma técnica poderosa como sistema automatizado de registro e classificação e poderá ser de grande valor para a indústria mineradora brasileira uma vez que amplia seu potencial competitivo a nível internacional.

Referências:

1 VALE. Disponível em: <http://www.vale.com/brasil/PT/investors/information-market/presentations-webcast/Paginas/default.aspx>. Acesso em: 17 set. 2020. 2 TUČEK, J. *et al* . Zeta-Fe₂O₃ – a new stable polymorph in iron(III) oxide family. **Scientific Reports** , v. 5, p. 1-11, 2015. DOI: 10.1038/srep15091.

PG12

Dynamics of matter waves undergoing Bloch oscillations in a ring cavity

BORGES, L. ; BACHELARD, R. ; COURTEILLE, P.

lucasgborges@usp.br

The main goal of this project is to study the synchronization of matter waves and the cooling potential of cold atomic clouds undergoing Bloch oscillations in an optical ring cavity, a setup which can be used as a gravity sensor. (1) While the proof-of-principle of the gravimeter concept has been demonstrated recently, investigating these phenomena will require the development of new analytical and numerical tools. In particular, parallel computation schemes will be particularly important to explore large timescales, which in turn allows studying the long-term stability of the gravimeter (and thus the precision of the sensing). The precise measurement of the gravitational field has important applications in various fields as it provides information on the composition of the environment, having important consequences in the field of oil prospection if drilling could be substituted by a non-invasive measurement. The first experiments of cold atomic clouds undergoing Bloch oscillations date back to the 90's and less than 10 years later the first measurements of gravity by that means were realized. (2) However, these experiments possessed the significant disadvantage of relying on a destructive measurement of the atomic cloud momentum, such that thousands of realizations have to be realized in order to produce a measurement with high precision. A potential solution to these issues was proposed recently by the collaborators of this project (1) based on the idea of using a ring cavity to harness continuously the light pulses resulting from the Bloch oscillations. This continuous measurement relies on a single realization, eliminating problems of fluctuations from shot to shot and reducing drastically the integration time.

Referências:

1 SAMOYLOVA, M. *et al* . Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity. **Optics Express** , v. 23, n. 11, p. 14823-14835, 2015. 2 FERRARI, G. *et al* . Long-lived Bloch oscillations with bosonic Sr atoms and application to gravity measurement at the micrometer scale. **Physical Review Letters** , v. 97, n. 6, p. 060402-1-060402-4, 2006.

PG13

White light emission and spectroscopic properties of tellurite-zinc glasses doped with Er^{3+} - Yb^{3+} - Tm^{3+}

CALDERÓN, G. L. ; SILVA, O. D. B. ; GONÇALVES, R. R. ; MANZANI, D. ; RIVERA, V. A. G. ; MAREGA, E.

glozano@usp.br

Tellurite-zinc glasses doped with Er^{3+} , Yb^{3+} and Tm^{3+} were characterised by absorption spectroscopy, refractive index, luminescence and up-conversion spectroscopy. Tunable blue to white light emission based on the colour mixing of red, green and blue light was obtained via up-conversion exciting the Yb^{3+} under 980 nm and by adjusting the laser excitation power. The Judd-Ofelt intensity parameters (Ω_2 , Ω_4 and Ω_6) were calculated for all samples and present the trend $\Omega_2 > \Omega_4 > \Omega_6$. For instance, the parameter Ω_2 of Tm^{3+} increases with the increment of Tm^{3+} doping concentration indicating that the covalency of Tm^{3+} and ligand anions increases as well as the asymmetry around Tm^{3+} . Such asymmetry may be attributed to the increase of the number of non-bridging oxygens in the glass structure. (1) Furthermore, luminescence spectroscopy was performed with a 405 nm laser to further understand the energy transfer mechanism between these lanthanide ions. Under 980 nm, different intermediate energy levels of Tm^{3+} and Er^{3+} are populated, and under 405 nm, the population of the Er^{3+} energy levels is greater than exciting with 980 nm, and therefore, more electrons prefer decay radiatively than transfer their energy to Tm^{3+} . The energy transfer micro-parameters (critical radius of interaction and energy transfer coefficient) were computed to further understand the spectroscopic behaviour of these ions. Our glasses are promising materials for solid-state lighting, photonic devices and for applications in plasmonics.

Referências:

1 LOZANO, G. *et al* . Cold white light emission in tellurite-zinc glasses doped with Er^{3+} - Yb^{3+} - Tm^{3+} under 980 nm. **Journal of Luminescence** , v. 228, 2020. DOI: 10.1016/j.jlumin.2020.117538

PG14

Study of semiconductor AlN with Density Functional Theory

BONANI, F. ; ALVES, H. ; SIPAHI, G. M.

Despite the large number of theoretical III-V semiconductor studies reported every year, our atomistic understanding is still limited. The limitations of the theoretical approaches to yield accurate structural and electronic properties on an equal footing are due the unphysical self-interaction problem that affects mainly the band gap and spin-orbit splitting (SOC) in semiconductors. In this work we studied structural and electronic properties of III-V semiconductor AlN in wurtzite phase with several functionals, in between them PBE (1) and HSE06>(2) Since DFT calculations sometimes require more computational effort, we were also interested in evaluate the total time spent to obtain each calculation and check the cost/benefit of each functional. At the end, in order to maximize the gaps, we used the DFT-1/2 strategy (3), so that we could compare with experimental data.

Referências:

1 PERDEW, P.; BURKE, K.; ERNZERHOF, M. Generalized gradient approximation made simple. **Physical Review Letters** , v. 77, n. 18, p. 3865-3868, 1996. 2 HEYD, J.; SCUSERIA, G. E. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. **Journal of Chemical Physics** , v. 118, n. 18, p. 8207-8215, 2003. 3 FERREIRA, L. G.; MARQUES, M.; TELES, L. K. Approximation to density functional theory for the calculation of band gaps of semiconductors. **Physical Review B** , v. 78, n. 12, p. 125116-1-125116-9, 2008.

PG15

Assimetria compartilhada e o mecanismo de Page-Wootters

CARMO, R. S. D. ; SOARES-PINTO, D. O.

rafael.carmo@gmail.com

Recentemente, certa atenção tem sido dada ao chamado mecanismo Page-Wootters (1) de relógios quânticos. Nele considera-se o tempo como um parâmetro inacessível, sendo que sua aparente passagem seria um fator emergente de correlações entre subsistemas de um estado global. Entre as várias propostas para explorar o mecanismo usando técnicas mais modernas, algumas optaram usar uma perspectiva de informação quântica, definindo e usando medidas informativas para quantificar o quão bem um sistema quântico R pode servir referencial para outro sistema quântico S . Neste trabalho (2), exploramos a proposta com base na teoria de recursos da assimetria, conhecida como assimetria mútua ou compartilhada, que na verdade é equivalente à abordagem da teoria da coerência no caso de interesse aqui: referenciais quânticos descritos pelo $U(1)$ grupo compacto. Estendemos alguns resultados anteriores da literatura sobre assimetria compartilhada e o mecanismo Page-Wootters (3) para casos mais gerais, culminando na enunciação de um teorema relacionando assimetria compartilhada de um estado bipartido $S+R$ com a entropia relativa de emaranhamento de estados internos nos setores de carga do Espaço de Hilbert. Usando este resultado, nós reinterpretemos a relação entre o mecanismo de Page-Wootters e emaranhamento além de também abrirmos alguns caminhos para novos estudos.

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 CARMO, R. S.; SOARES-PINTO, D. O. **Shared asymmetry as relative entropy of entanglement**. 2020. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2007.15592>. Acesso em: 10 set. 2020. 3 MARTINELLI, T.; SOARES-PINTO, D. O. Quantifying quantum reference frames in composed systems: local, global, and mutual asymmetries. **Physical Review A**, v. 99, n. 4, p. 042124-1-042124-10, 2019.

PG16

Diversidade de opiniões e bolha sociais no modelo de Sznajd adaptado

BENATTI, A.

alexandre.benatti@usp.br

Entender a maneira pela qual a opinião humana muda ao longo do tempo e do espaço constitui um dos grandes desafios da pesquisa em sistemas complexos. E uma abordagem desenvolvida e usada para estudar a dinâmica de opinião é o modelo de Sznajd. (1) Modelo este que fornece algumas características particularmente interessantes, como a sua simplicidade e capacidade de representar alguns dos mecanismos que se acredita estarem envolvidos na dinâmica de opinião. Nosso trabalho se focou em estudar como esses sistemas tendem a produzir distribuições de estado mais ou menos uniformes. Além disso, também é importante entender como as modificações em tais sistemas, por exemplo aumentando ou reduzindo a interconectividade, podem influenciar a respectiva dinâmica. Para isso desenvolvemos uma abordagem, nomeada Modelo Sznajd Adaptado, em que as mudanças de opinião por um indivíduo (isto é, um nó de rede) implicam em possíveis alterações na topologia da rede. Isso foi feito permitindo que os agentes alterem suas conexões para outros vizinhos com o mesmo estado com uma dada probabilidade. A diversidade é definida com base na teoria da informação, mais especificamente na entropia de Shannon, termos de frequências relativas das opiniões.(2) Assim diversidade foi calculada como a exponencial da entropia da densidade de opiniões. Neste trabalho foi abordado a capacidade da dinâmica em simular bolhas sociais, mostrando que a diversidade pode ser fortemente afetada pela probabilidade de um agente da rede em mudar sua opinião de forma espontânea e que dependendo dos parâmetros usados, os agentes vão terminar conectados apenas aos que concordam com sua opinião resultado esse visto em redes sociais reais. (3)

Referências:

1 SZNAJD-WERON, K.; SZNAJD, J. Opinion evolution in closed community. **International Journal of Modern Physics C**, v. 11, n. 6, p. 1157-1165, 2000. 2 JOST, L. Entropy and diversity. **Oikos**, v. 113, n. 2, p. 363-375, 2006. 3 NIKOLOV, D. *et al*. Measuring online social bubbles. **PeerJ Computer Science**, v. 1, p. e38, 2015. DOI: 10.7717/peerj-cs.38

PG17

QCD perturbativa em ordens altas no decaimento Higgs em dois fótons

NEVES, G. A. D. ; BOITO, D.

abo.gneves@gmail.com

Na ausência de observação direta de física além do modelo padrão no LHC (1), testes precisos da teoria requerem precisão cada vez maior. A largura de decaimento do bóson de Higgs em fótons é conhecida, de forma incompleta, até quarta ordem no acoplamento forte, α_s , enquanto o conhecimento exato das correções é conhecido até segunda ordem (N2LO). (2) Neste trabalho, calculamos, pela primeira vez, os efeitos devidos a correções de QCD de ordem superiores no decaimento $H \rightarrow \gamma + \gamma$ através do chamado limite large- β_0 (3), no qual as correções advindas dos termos dominantes em n_f são conhecidas em todas as ordens em α_s . A análise das singularidades da série no espaço de Borel nos permite estudar, de forma semi-qualitativa, o comportamento da série com as variações da escala de energia. Além disso, calcularemos a soma de Borel da série devido à contribuição dos diagramas *leading*- n_f , procurando entender a significância dos diagramas ignorados, i.e. o quão relevante são os diagramas sub-dominantes em n_f , e a melhor escala de energia para estimar as correções de QCD do processo $\Gamma(H \rightarrow \gamma\gamma)$.

Referências:

- 1 ATLAS COLLABORATION. **COMBINED measurements of Higgs boson production and decay using up to 80 fb⁻¹ of proton–proton collision data at $\sqrt{s} = 13$ TeV collected with the ATLAS experiment** . 2018. Disponível em: <https://inspirehep.net/files/6029d0009707f64e1c2dd985612e9175>. Acesso em: 23 jan. 2020.
- 2 STURM, C. Higher order QCD results for the fermionic contributions of the Higgs-boson decay into two photons and the decoupling function for the $\overline{\text{MS}}$ renormalized fine-structure constant. **European Physical Journal C** , v. 74, p. 2978, 2014. DOI: 10.1140/epjc/s10052-014-2978-0.
- 3 BENEKE, M. **Renormalons** . 1998. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/hep-ph/9807443.pdf>. Acesso em 23 jan. 2020

PG18

Determinação precisa da massa do quark c

RODRIGUES, M. V. ; BOITO, D.

marcus.gonzalez.rodrigues@usp.br

Na ausência de observação direta de física além do Modelo Padrão no LHC, testes precisos da teoria requerem precisão cada vez maior. Em muitos cálculos, o fator limitante é a precisão dos parâmetros fundamentais da QCD, a saber, o acoplamento forte e a massa dos quarks. No caso da massa do quark c , um método muito promissor para sua extração é o uso de regras de soma para o correlator pseudo-escalar, onde a previsão teórica da QCD perturbativa é comparada a dados de QCD na rede, que são cada vez mais precisos.(1) No momento, esta determinação é limitada pela precisão teórica, pois a série perturbativa do correlator pseudo-escalar, conhecida até terceira ordem em α_s , é bastante instável. O objetivo deste trabalho é compreender em termos das singularidades conhecidas como *renormalons*(2), a origem desta instabilidade na série perturbativa. Assim, poderemos encontrar métodos rigorosos com o objetivo de contornar esta instabilidade e poder utilizar plenamente os dados de QCD na rede para uma determinação precisa de m_c e contribuir para testes precisos do Modelo Padrão.

Referências:

1 DEHNADI, b. *et al* . Bottom and charm mass determinations with a convergence test. **Journal of High Energy Physics** , v.8, p.155, 2015. DOI 10.1007/JHEP08. 2 BENEKE, B. Renormalons. **Physics Reports** , v.317,n.1-2,p.1–142, 1999.

PG19

Intra-scales energy transfer during the evolution of turbulence in a trapped Bose-Einstein condensate

OROZCO, A. D. G. ; MADEIRA, L. ; GALANTUCCI, L. ; BARENGHI, C. ; BAGNATO, V. S.

arnolgarcia@ifsc.usp.br

In turbulence phenomena, including the quantum turbulence in superfluids, an energy flux flows from large to small length scales, composing a cascade of energy. A universal characteristic of turbulent flows is the existence of a range of scales where the energy flux is scale-invariant: this interval of scales is often referred to as inertial region. This property is fundamental as, for instance, in turbulence of classical fluids it characterizes the behavior of statistical features such as spectra and structure functions.(1-2) Here we show that also in decaying quantum turbulence generated in trapped Bose-Einstein condensates (BECs), intervals of momentum space where the energy flux is constant can be identified. Indeed, we present a procedure to measure the energy flux using both the energy spectrum and the continuity equation. A range of scales where the flux is constant is then determined employing two distinct protocols and in the same range, the momentum distribution measured is consistent with previous work.(3) The successful identification of a region with constant flux in turbulent BECs is a manifestation of the universal character of turbulence in these quantum systems. These measurements pave the way for studies of energy conservation and dissipation in trapped atomic superfluids, and also analogies with the related processes that take place in ordinary fluids.

Referências:

1 ZAKHAROV, V.; L'VOV, V.; FALKOVICH, G.; KOLMOGOROV, v. **Spectra of turbulence I** : wave turbulence. Heidelberg: Springer Verlag, 2023. (Series in Nonlinear Dynamics). 2 MADEIRA, L.; CARACANHAS, M.; SANTOS, F. D.; BAGNATO, V. Quantum turbulence in quantum gases, **Annual Review Condensed Matter Physics** , v.11, n.1,p.37-56,2020. 3 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; ROATI, G.; MAGALHAES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Emergence of turbulence in an oscillating Bose-Einstein condensate, **Physical Review Letters** , v.103,n.4, p.045301,2009.

PG20

A phase contrast method to shape light through optimal beam splitting

SILVA, P. F. ; MUNIZ, S.

pedro.faleiros.silva@usp.br

The ability to shape, correct and have the more accurate control of a laser beam is important for many research and industry areas, especially for important contemporary problems of modern physics as quantum simulation with cold atoms and optical tweezers experiments. In this project, has been developed a new approach based on Zeroth Order Phase Contrast Technique (1) to generate high definition gray level images by phase-only control of light, being its main advantage the easier practical implementation and facility to improve a directly mapping between the final images and their phase mask, compared to well-knowm techniques as traditional Holography and Generalized Phase Contrast method.(2) The approach of this project works controlling the splitting of light on axis in thiny regions due the phase contrast between a binary diffraction grating and the target information on a Liquid Crystal Spatial Light Modulator, and uses a 4f-correlator to generate very sharp, speckles-free and smooth images at the target plane. Therefore, it will be presented the procedure to code amplitude information on a laser beam, the high definition images obtained and the application of this approach on a flat-top flatness correction.

Referências:

1 PIZOLATO, J. *et al* . Zeroth-order phase-contrast technique. **Applied Optics** , v. 46, n. 31, p. 7604-7613. 2007. 2 BANAS, A .; GLUCKSTAD, J. Light shapping with holography, GPC and holo-GPC. **Optical Data Processing and Storage** , v. 3, n.1,p.20-40, 2017.

PG21

QCD perturbativa em ordens altas no decaimento $H \rightarrow b\bar{b}$

LONDON, C. Y. M. ; BOITO, D.

cristiane.london@usp.br

Na ausência de observação direta de física além do modelo padrão no LHC, testes precisos tanto da teoria quanto experimentais requerem precisão maior. O decaimento do bóson de Higgs em quarks bottom é conhecido até quarta ordem no acoplamento forte α_s . (1) Essa série é divergente e assumida assintótica e suas propriedades são melhor analisadas se considerarmos sua transformada de Borel. Nesse trabalho, empregamos o método dos aproximantes de Padés (2) para reconstruir a transformada de Borel da parte imaginária do correlator escalar a fim de se estudar seus renormalons e suas correções de ordens mais altas. Iniciamos testando esse método no limite large- β_0 da QCD, onde a série perturbativa é conhecida em todas as ordens (3), usando-o como um laboratório para determinar a melhor estratégia para reconstruir a série em ordens mais altas usando somente os quatro primeiros coeficientes. Nossos resultados preliminares mostram que o procedimento converge para ordens altas como esperado, no entanto não rápido o suficiente para obter previsões confiáveis em QCD. Portanto, é necessário analisar estratégias alternativas para acelerar a convergência como empregar esse método no correlator escalar ou usar outros procedimentos como os chamados aproximantes de Padés parciais. (2) Pretendemos assim prever as contribuições de ordens mais altas da série em QCD e então obter com segurança erros devido ao truncamento da teoria perturbativa, contribuindo para o conhecimento preciso do decaimento do bóson de Higgs em quarks bottom no modelo padrão.

Referências:

1 HERZOG, F. *et al* . On Higgs decays to hadrons and the R-ratio at N4LO. **Journal of High Energy Physics** , v. 2017, n. 8, p. 113-1-113-25, Aug. 2017. 2 BAKER JUNIOR, G. A.; GRAVES-MORRIS, P. **Padé approximants** . 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996. 764 p. (Encyclopedia of Mathematics and its Applications, 59). 3 BROADHURST, D. J.; KATAEV, A. L.; MAXWELL, C. J. Renormalons and multi-loop estimates in scalar correlators: Higgs decay and quark mass sum rules. **Nuclear Physics B** , v. 592, n. 1-2, p. 247-293, 2001.

PG22

Spin relaxation of holes in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells

TAVARES, B. ; POUSSEP, Y.

belarmino@ifsc.usp.br

Polarization-resolved Photoluminescence was used to study spin relaxation of photoexcited holes in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells in a quantizing magnetic field as a function of temperature. At a temperature below 10K, a non-equilibrium population of the spin-split valence band Landau levels was temperature-independent and determined by the ratio of the hole lifetime and spin relaxation time. Increasing temperature resulted in efficient hole spin thermalization in the Zeeman split valence band Landau levels. Dyakonov-Perel mechanism(1) is proposed for the observed spin relaxation leading to a thermal equilibrium population of the spin-split Landau levels. Fits of the experimental data by the theory allowed a determination of the hole spin relaxation times related to different Landau levels and the corresponding hole effective g-factor. Direct measurements of the hole spin relaxation times prove the obtained results.

Referências:

1 DYAKONOV, M. I.; PEREL, V. I. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A* , v. 35, n. 6, p. 459-460, 1971.

PG23

Otimização e elucidação da atividade antibacteriana de peptídeos catiônicos em patógenos multirresistentes

RIGHETTO, G. M. ; LEAL, T. C. ; LOPES, J. L. D. S. ; SANTOS-FILHO, N. A. ; BELTRAMINI, L. M. ; CILLI, E. M. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.

gmrightetto@gmail.com

Apesar dos avanços no tratamento de doenças infecciosas, microrganismos patogênicos continuam sendo uma ameaça à saúde pública. (1) A escassez de opções terapêuticas leva ao interesse em novos compostos. Por isso, peptídeos antimicrobianos, como a Bothropstoxina-I (2) e Plantaricina 149 (3), estão sendo reinvestigados por terem atividade que pode ser aperfeiçoada. Este estudo visa otimizar a ação destes compostos, propondo modificações e avaliando inicialmente sua atividade antimicrobiana e hemolítica. Todos os peptídeos foram sintetizados em fase sólida. O potencial antibacteriano foi avaliado por meio da determinação da concentração inibitória mínima (CIM) para bactérias patogênicas (*Staphylococcus epidermidis* ATCC 35984, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Enterococcus faecalis* ATCC 29212, *Enterococcus faecium* ATCC 700221, *Klebsiella pneumoniae* ATCC 700603, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Acinetobacter baumannii* ATCC 19606 e *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853). Eritrócitos humanos foram usados para avaliar a hemólise. Os primeiros análogos da Bothropstoxina-I sintetizados, (NA1307)K ((KKYRYHLKPF)2K) e E(NA1307) (E(KKYRYHLKPFCKK)2) permitiram investigar se a dimerização no C-terminal ou no N-terminal teriam papel na atividade antimicrobiana. (NA1307)K foi o mais ativo contra as linhagens testadas, não apresentando hemólise significativa. Um Ala-Scan do peptídeo (NA1307)K foi feito, mas todos os resultados mostraram um desempenho inferior. A partir disto, os análogos NA1896, (KKWRWHLKPF)2K e NA1897, (KKWRWHLKPW)2K, modificações do peptídeo (NA1307)K, foram propostos para utilizar as propriedades do triptofano para aumentar a atividade antimicrobiana sem aumento significativo da hemólise. O peptídeo NA1897 foi o mais ativo de todos, com baixa taxa hemolítica, sendo o escolhido para estudo. Quanto a atividade antibiofilme para *S. epidermidis*, o peptídeo (NA1307)K obteve a maior redução ((30 ± 9)%). Dentre os análogos da Plantaricina 149, Pep7 (FMOC-YSLQMGATAIKQVKKLFKKG) foi o primeiro sintetizado, mantendo o grupo protetor FMOC, resultando em um aumento na atividade antibacteriana, porém com alta hemólise. Uma série de peptídeos foi sintetizada com o intuito principal de diminuir a atividade hemolítica, maior obstáculo encontrado. As modificações mais significativas envolveram o aminoácido triptofano e o estabelecimento de uma hélice anfipática com faces hidrofóbicas e carregadas bem definidas. O Pep20 (FMOC-KAVKKLFKKG) ganhou destaque pela alta atividade antimicrobiana, com atividade hemolítica reduzida. O peptídeo Pep2S (YAVKKLFKKG), apesar de não apresentar atividade antimicrobiana, apresentou a maior redução do biofilme ((43 ± 14)%). Dessa forma, sua capacidade de redução deve estar relacionada a outras estruturas do biofilme ou interferência do quorum sensing. Os peptídeos Pep20 e NA1897 tiveram sua CIM determinada para 60 bactérias de linhagens e perfis de resistência diferentes, o que mostrou o amplo espectro de ação de ambos os peptídeos. A cinética de morte destes peptídeos também foi avaliada em duas linhagens de *S. aureus* e duas linhagens de *A. baumannii*. Tanto para NA1897 quanto para Pep20 observou-se uma ação rápida contra bactérias gram positivas e gram negativas, com redução total de sobreviventes observada em no máximo duas horas para todas as concentrações testadas. Portanto, a otimização de ambos os peptídeos foi realizada com sucesso, com baixos sinais de toxicidade, amplo espectro de ação e morte celular rápida. A partir de agora, a elucidação do mecanismo de ação destes peptídeos é prioridade do projeto.

Referências:

- 1 MULANI, M. S. *et al* . Emerging strategies to combat ESKAPE pathogens in the era of antimicrobial resistance: a review. **Frontiers in Microbiology** , v. 10, 2019. DOI: 10.3389/fmicb.2019.00539.
- 2 SANTOS-FILHO, N. A. *et al* . Antibacterial activity of the non-cytotoxic peptide (p-BthTX-I)₂ and its serum degradation product against multidrug-resistant bacteria. **Molecules** , v. 22, n. 11, p. 1–14, 2017.
- 3 LOPES, J. L. DE S. *et al* . Interaction of antimicrobial peptide Plantaricin149a and four analogs with lipid bilayers and bacterial membranes. **Brazilian Journal of Microbiology** , v. 44, n. 4, p. 1291–1298, 2013.

PG24

Explorando macrófagos associados à leucemia promielocítica aguda como transportadores de nanoterapêuticos à células leucêmicas via interação de receptores CD44 e ácido hialurônico

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

luana.antonio@usp.br

Os macrófagos são células do sistema mononuclear fagocítico que respondem a sinais extracelulares adotando diferentes polarizações fenotípicas funcionais. Tal plasticidade contribui para a progressão de diversas doenças, incluindo o câncer. As células leucêmicas recrutam macrófagos e induzem sua polarização para fenótipos pró-leucêmicos na medula óssea e baço dos pacientes. Tais macrófagos favorecem a progressão da doença e resistência a fármacos.(1-2) Estas células também podem estar associadas a rápida e substancial eliminação de nanoterapêuticos in vivo, área de interesse em Nanomedicina. Tradicionalmente, as propriedades de nanoterapêuticos são ajustadas visando evadir os macrófagos. Entretanto, explorá-los como alvos terapêuticos pode ser uma alternativa, visto que a presença destas células está relacionada à redução da sobrevivência. O CD44 é um receptor expresso em macrófagos que se liga ao ácido hialurônico (AH) e apresenta níveis de expressão distintos para diferentes polarizações dos macrófagos.(3) Explorando a capacidade dos macrófagos de funcionarem como depósitos e transportadores para as nanopartículas carreadoras (NCs), propomos neste trabalho o estudo da interação de três configurações de NCs a base de poli (ácido lático-co-ácido glicólico) (PLGA), a saber: i) NCs modificados com poli etileno glicol (PEG), para evadir do sistema imune; ii) NCs modificados com ácido hialurônico, para interagir com o receptor CD44 e iii) NCs não-modificados - em co-culturas de macrófagos e células leucêmicas. A internalização desses NCs será analisada por citometria de fluxo e, para avaliar a eficácia desses nanocarreadores contra células leucêmicas, formulações contendo trióxido de arsênio, um fármaco comumente utilizado no tratamento de leucemia promielocítica aguda, serão analisadas quanto à viabilidade celular, à geração de espécies de oxigênio reativo e à morfologia celular.

Palavras-chave: Nanocarreadores. Macrófagos. Leucemia. Nanomedicina.

Referências:

1 PETTY, A. J.; YANG, Y. Tumor-associated macrophages in hematologic malignancies [U+202F]: new insights and targeted therapies. *Cells*, v. 8, n. 12, p. 1526, 2019. DOI: 10.3390/cells8121526 2 PEI, Y.; YEO, Y. Drug delivery to macrophages: challenges and opportunities. *Journal of Controlled Release*, v. 240, p. 202–211, 2016. DOI: 10.1016/j.jconrel.2015.12.014. 3 GEE, K. *et al*. Differential regulation of CD44 Expression by lipopolysaccharide (LPS) and TNF- in human monocytic cells: distinct involvement of c-Jun N-terminal Kinase in LPS-induced CD44 expression. *Journal of Immunology*, v. 169, n. 10, p. 5660–5672, 2002. DOI: 10.4049/jimmunol.169.10.5660.

PG25

Geometria diferencial e teoria da informação

MAGNO, G. F. ; SOARES-PINTO, D. O. ; FERREIRA, C. H. G.

gabriel.magno@usp.br

Neste trabalho temos o objetivo de mostrar como aplicações de geometria diferencial em problemas da teoria da informação podem se mostrar abordagens poderosas, aprofundando nossa visão da física contida nestas questões. A fim de atender a demanda vamos apresentar nossos recentes empenhos e perspectivas, passando por um resultado desenvolvido durante o regime de mestrado, no contexto de inferência estatística uniparamétrica, acerca de correções de ordem superior para a cota de Cramér-Rao para dois observáveis canonicamente conjugados, onde a estatística do resultado de uma medida é gerada por um estado quântico misto (1); seguindo para o problema que emanou naturalmente do resultado anterior, e que nos concentramos no momento presente, trataremos da escolha de uma fase global privilegiada na evolução via dinâmica Halmiltoniana de um estados puros que está relacionada com a estrutura geométrica intrínseca do espaço de estados, como a métrica de Fubini-Study e holonomia (2); por fim, daremos uma perspectiva do que pretendemos desenvolver durante o regime de doutorado, mostrando um problema que nos servirá de norte, cujo conteúdo trabalha com a relação de geodésicas em espaços de estados e complexidade computacional. (3)

Referências:

1 BRODY, D. C. Information geometry of density matrices and state estimation. **Journal of Physics A** , v. 44, n. 25, p. 252002-1-252002-8, 2011. 2 ANDERSSON, O. **Holonomy in quantum information geometry** . 2018. 84 p. Thesis (Licentiate of Philosophy in Theoretical Physics) - Stockholm University, Stockholm, 2018. 3 NIELSEN, M. A. *et al* . Quantum computation as geometry. **Science**, AAAS, v. 311, n. 5764, p. 1133-1135, 2006.

PG26

Triagem virtual para descoberta de inibidores da Mpro de SARS-CoV-2

NOGUEIRA, V. ; FREIRE, M. C. L. C. ; SOUZA, G. ; FERRAZ, M. ; OLIVA, G. ; LINS, R. ; GUIDO, R. V. C.

victor.nogueira@usp.br

No final de 2019, células do epitélio respiratório de pacientes que sofriam de pneumonia devido a causas desconhecidas, em Wuhan, na China, permitiram a identificação de um novo vírus, o coronavírus da síndrome respiratória aguda grave 2 (do inglês, SARS-CoV-2), responsável pela doença do Coronavírus 2019 (COVID-19). (1) Esta doença se espalhou de maneira extremamente rápida ao redor do mundo, o que fez com que a Organização Mundial de Saúde declarasse, em março de 2020, pandemia do novo Coronavírus e estimulasse, em todos os países, a adoção de medidas de contenção da disseminação da doença. Alguns meses após o decreto de pandemia, em meados de setembro, o COVID-19 já havia feito mais de 136 mil vítimas fatais apenas no Brasil, ultrapassando a marca de 4,5 milhões de infectados no país. Assim, o objetivo desta etapa do trabalho foi realizar triagens virtuais utilizando diversas bibliotecas de compostos a fim de identificar potenciais inibidores da protease principal de SARS-CoV-2 (Mpro), uma proteína não-estrutural essencial para a replicação viral. Para isso, o servidor *MTiScreenOpen* (2), o qual é baseado em *Autodock Vina*, foi escolhido. Ao todo, 12548 compostos de 12 bibliotecas diferentes foram testados contra a Mpro, avaliando os modos de interação entre as moléculas e o sítio da proteína. Como diferencial dos outros trabalhos que têm sido reportados na literatura ao longo dos meses de pandemia, os 10 melhores compostos classificados durante a triagem feita com a biblioteca de compostos extraídos da fauna e flora brasileira NuBBEDB, do inglês *Nuclei fo Bioassays, Ecophysiology and Biosynthesis of Natural Products Database* (3), foram escolhidos para dar prosseguimento com estudos de dinâmica molecular (DM). Para cada um dos complexos e para proteína livre foram feitos 100 ns de simulações de DM utilizando o pacote de programas AMBER19. Dos 10 compostos, seis deles, sendo quatro flavonoides e 2 terpenos, permaneceram estáveis durante todo o período simulado, enquanto os outros quatro saíram do sítio ativo poucos nano segundos após o início da simulação. A interação entre os compostos que permaneceram no sítio durante as simulações foi avaliada por meio da energia livre de ligação utilizando os métodos como LIE (linear interaction energy) e MM-GBSA (Molecular Mechanics-Generalized Born Surface Area). Espera-se que esse seis compostos possam ser testados contra a proteína em ensaios enzimáticos tão logo quanto eles sejam disponibilizados para nosso laboratório.

Referências:

1 ZHU, N. *et al* . A novel coronavirus from patients with pneumonia in China, 2019. **New England Journal of Medicine** , v. 382, 2020. DOI: 10.1056/NEJMoa2001017. 2 LABBÉ, C. M. *et al* . MTiOpenScreen: a web server for structure-based virtual screening. **Nucleic Acids Research** , v. 43, 2015. DOI: 10.1093/nar/gkv306. 3 PILON, A. C. *et al* . NuBBEDB: an updated database to uncover chemical and biological information from Brazilian biodiversity. **Scientific Reports** , v. 7, n. 1, p. 7215, 2017.

PG27

Study of quantum complexity in a purified system

MORAZOTTI, N. ; NAPOLITANO, R.

nicolas.morazotti@gmail.com

In a quantum system perturbed by the environment, quantum errors are not completely avoidable. The existence of the environment itself implies that any given eigen-state of a pure Hamiltonian rapidly decays, hampering the information storage and processing in quantum computers. An important concept related to quantum error correction is *quantum complexity*, understood as a scarce resource consumed by the system as it evolves. To understand complexity, we based our studies in references. (1-2) We wish to extend the complexity definition to non-unitary transformations. Therefore, we must get used to the usual concept of complexity, as well as understand a more helpful formalism of system evolution, the Kraus operators. We have studied the complexity definition as used by Nielsen et al. To the authors, complexity is a function that determines how hard it is to implement a Hamiltonian. We may use such function to define a Riemannian geometry in the unitaries space. Complexity, then, is the distance between two possible quantum states, united through an unitary. With a solid understanding of its notion, the next step is to define the complexity of a double state, product of purification of a simple mixed state. In this way, we are able to study the evolution of the system complexity by simulating Deutsch Jozsa algorithm in the presence of a bosonic bath. In the meantime, it is also in development a paper discussing Kraus operators optimized for operational probabilistic theories. In such paper, we describe a $\sqrt{\text{extSWAP}}$ gate and its action in presence of dephasing noise. In the near future, we will compare the noisy optimized dynamics and the ideal case under the lens of time-symmetric operational probabilistic theories.

Referências:

1 NIELSEN, M. A. *et al* . Quantum computation as geometry. **Science** , v. 311, n. 5764, p. 1133–1135, 2006. DOI: 10.1126/science.1121541. 2 BROWN, A. R.; SUSSKIND, L. Second law of quantum complexity. **Physical Review D** , v. 97, n.8, p. 086015, 2018. DOI: 10.1103/PhysRevD.97.086015.

PG28

Descoberta de derivados de marinoquinolina como inibidores de *Plasmodium falciparum*

SOUZA, G. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C. ; SANTO, R. D. E. ; BARBOSA, P. S. ; CAPITÃO, R. ; CORREIA, C. R.

guilherme.eduardo.souza@usp.br

A malária é a doença tropical com maior taxa de mortalidade global. O surgimento de resistência às terapias de primeira linha reforça a necessidade de descoberta e desenvolvimento de novos candidatos a fármacos.(1) O objetivo deste trabalho foi a descoberta de novos derivados marinoquinolínicos como inibidores do desenvolvimento da forma assexuada de *Plasmodium falciparum*. Nesse sentido, as posições 1, 3, 4 e 7 do núcleo marinoquinolínico foram exploradas para a obtenção de derivados mais potentes e seletivos. Um total de 137 compostos foram sintetizados e tiveram sua atividade biológica avaliada quanto a potência inibitória, citotoxicidade e seletividade. Um subconjunto de moléculas teve sua permeabilidade *in vitro* avaliada. O desenvolvimento da série de marinoquinolinas deste trabalho levou à identificação de 35 moléculas com potência submicromolar contra *P. falciparum in vitro*, com destaque ao composto 71, com $extIC_{50}^{3D7} = 0,06 \mu\text{M}$, SI > 3600.

Referências:

1 AGUIAR, A. C. C. *et al* . Discovery of Marinoquinolines as potent and fast-acting plasmodium falciparum Inhibitors with in vivo activity. **Journal Medical Chemistry** ., v. 61, n. 13, p. 5547–5568, 2018.

PG29

Fast rotating BEC in a ring trap

TOMISHIYO, G. ; CARACANHAS, M. A.

tomishiyo@gmail.com

Since its experimental realization, the study of Bose-Einstein condensates has given many contributions to different areas of physics: from atomic physics to condensed matter, optics and high energy physics. Its realization in dilute cold gases have many virtues: from a theoretical point of view, the macroscopic occupation of a single particle state greatly simplify the theory. In particular, a mean field approach is applicable for many problems of interest. From an experimental point of view, there is great control over the system; the interaction strength and sign can be changed with an applied magnetic field, exploring the Fano-Feshbach resonances, and the geometry can be controlled by using different potentials, realized in laboratory with optical or magnetic traps. The most extensively investigated trap is a harmonic potential. The frequency of the harmonic trap is, however, reduced when considering a rotating condensate, due to centrifugal effects, making it impossible to increase the angular velocity past the trap's frequency. This impossibility has prompted the research for anharmonic potentials. (1) One such potential is the bubble trap, obtained by an adiabatic deformation of a magnetic trap. In many situations of interest, the bubble potential can be thought as being a displaced harmonic oscillator type potential, or ring potential. (2) It allows for a great control of the system's topology and shape, and it also provides an anharmonic confinement, thus allowing the investigation of the rapidly rotating regime. Experiments were complicated by gravitational sag, but the upcoming possibility of realizing the experiment in microgravity conditions renew excitement for studies in the topic. (3) In this work we investigate the physics of rotating BEC in a ring trap. We attempt to characterize the system's ground state by supposing it to be described by the product of a dislocated Gaussian envelope and a polynomial whose roots describes the positions of the vortices, choosing parameters that minimizes the system's energy. In order to ensure a good ground state, we compare our results to the profile obtained in a numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation. In the future, we plan to use this ground state to study collective modes: both the BEC cloud modes and the modes of the vortex network are of interest. Accordingly, we employ a sum rule approach for the analytical calculation of modes of the cloud, and a hydrodynamic description with elements of elasticity theory for the network.

Referências:

1 FETTER, A. *et al* Rapid rotation of a Bose-Einstein condensate in a harmonic plus quartic trap. **Physical Review A** , v. 71, n. 1, p. 013605, 2005. 2 PERRIN, H.; GARRAWAY, B. Trapping atoms with radio frequency adiabatic potentials. **Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics** , v. 66, p. 181, 2017. DOI: 10.1016/bs.aamop.2017.03.002 3 AVELINE, D. *et al*. Observation of Bose-Einstein condensates in an earth-orbiting research lab. **Nature** , v. 582, p. 193, 2020. DOI: 10.1038/s41586-020-2346-1.

PG30

Influência das características de conectividade na execução distribuída de tarefas em redes complexas

PASTORE, A. M.

alexandre.pastore@usp.br

Diversos sistemas são compostos por elementos que interagem entre si ao desempenhar as suas funções, o que torna sua representação como redes complexas apropriadas. (1) Iremos estudar a influência de características topológicas da rede de interconexão entre os agentes na eficiência da execução da rede de interconexão entre os agentes na eficiência da execução distribuída de tarefas. Mais explicitamente, serão consideradas características dos nós (grau médio, heterogeneidade da distribuição de graus e correlações entre graus de nós conectados entre si) e de localidade das ligações (presença de conjuntos de três nós conectados entre si, localidade das ligações quando os nós estão distribuídos em um espaço geométrico de dimensionalidade finita e formação de comunidades de nós altamente conectados entre si mas com poucas conexões com os restantes). As tarefas serão consideradas homogêneas em suas características (ou tarefas idênticas ou com diferenças aleatórias sorteadas de distribuições sem cauda longa) e similarmente geradas por qualquer agente. Com isso pretendemos adquirir informações sobre que tipo de características topológicas uma rede deve possuir para que ela seja adequada à execução distribuída de tarefas, isto pode ser importante na situação em que uma rede em que se pretende usar para execução de tarefas e por uma análise puramente topológica prever se seu desempenho será apropriado ou não, pode se usar quando se tem um conjunto de agentes a serem interligados para execução de tarefas, tem-se indicações sobre que tipo de topologia deve ser gerada para uma boa eficiência, além da situação em que uma certa rede está sendo usada para execução de tarefas, pode-se propor alterações que levem a um incremento em sua eficiência.

Referências:

1 COSTA, L. F. *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

PG31

Avaliando a produção de raios cósmicos ultra energéticos em Centaurus A usando neutrinos e fótons secundários como mensageiros

OLIVEIRA, C. ; SOUZA, V. D.

caina.oliveira@usp.br

A produção de partículas energéticas no Universo continua sendo um dos grandes mistérios da ciência moderna. Os mecanismos de aceleração de partículas em fontes astrofísicas são ainda desconhecidos e resultados recentes apontam para a necessidade de uma abordagem multi-mensageiro para resolver este problema. (1) Nos últimos anos, medidas precisas da anisotropia de raios cósmicos carregados apontam para a necessidade de fontes extragaláticas próximas, no entanto, a contrapartida neutra (neutrinos e raios gamas) que poderia apontar para a fonte, não tem sido medida. Estudos recentes indicam que os *backflows* de jatos emitidos por Núcleos Ativos de Galáxias são regiões especialmente favoráveis para aceleração de partículas, o que torna radio galáxias possíveis fontes especialmente interessantes. (2) Neste trabalho Centaurus A é explorada como fonte local de raios cósmicos de altas energias. Supomos que a fonte produz um espectro geral do tipo lei de potência com um corte exponencial e, tanto a normalização do fluxo, quanto a energia de corte é obtido por meio da luminosidade em radio da fonte, restando três parâmetros livres: o índice espectral e dois fatores intrínsecos da fonte. A propagação das partículas foi realizada usando o *framework* CRPropa 3, com todas as perdas de energias relevantes, em um universo permeado por radiação de fundo de micro-ondas e luz de fundo extragalática. Três modelos de campos magnéticos extragaláticos (CMEG) estruturados foram escolhidos e diferem quanto a origem (Primordial e Astrofísica) e intensidade: (3) Primordial (muito intenso), Primordial2R (intenso) e Astrofísico (fraco). Cinco composições foram exploradas. Comparando as direções de detecção dos raios cósmicos nos CMEG explorados, percebemos que as deflexões podem ou não ser importantes, mesmo para uma fonte tão próxima quanto Centaurus A, principalmente na fração menos energética (< 100 EeV, no caso de raios cósmicos). Da mesma forma, os neutrinos detectados nem sempre apontam para a fonte. Ajustando o fluxo de raios cósmicos às medidas do Observatório Pierre Auger, calculamos o fluxo de neutrinos gerados durante a propagação, estando tal fluxo abaixo da curva de sensibilidade do Observatório futuro GRAND - *Giant Radio Array for Neutrino Detection*. Desta forma, concluímos que é importante levar em conta CMEG estruturados que podem defletir significativamente mesmo raios cósmicos altamente energéticos e, no caso particular de Centaurus A, os neutrinos podem ainda não ter sido medidos por falta de sensibilidade.

Referências:

1 ALVES BATISTA, R. *et al* . Open questions in cosmic-ray research at ultrahigh energies. **Frontiers in Astronomy and Space Sciences** , v. 6, p. 23-1-23-35, June 2019. 2 MATTHEWS, J. H. *et al* . Ultrahigh energy cosmic rays from shocks in the lobes of powerful radio galaxies. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society** , v. 482, n. 4, p. 4303-4321, Feb. 2019. 3 HACKSTEIN, S. *et al* . Simulations of ultra-high energy cosmic rays in the local Universe and the origin of cosmic magnetic fields. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society** . v. 475, n. 2. p. 2519-2529, Apr. 2018.

PG32

Modelando brainstorm com sistemas quadro-negro

SALHANI, J. A. S. ; FONTANARI, J. F.

jorge.salhani@usp.br

As áreas de conhecimento pertencentes às ciências exatas costumam estar vinculadas à descrição e predição de fenômenos determinísticos, geralmente apontados como possuidores de precisão infinita em um dado espaço de fase finito e contínuo em seu domínio. (1) Por outro lado, sistemas complexos necessitam que seja contabilizada a interação das entidades (ou agentes) que fazem parte do sistema, o que confere a ele caráter estocástico e possuidor de propriedades emergentes. (2) Sistemas cooperativos são exemplos de fenômenos desta natureza e representam o foco deste trabalho. Nosso objetivo é descrever e analisar sistemas cooperativos utilizando modelos de múltiplos agentes, em particular sistemas de quadro-negro (3), que partem do modelo heurístico de trabalho em grupo, onde uma equipe de pessoas é designada para resolver um problema (utilizaremos aqui problemas combinatórios cripto aritméticos) e a elas são permitidas a escrita e a leitura de informações relevantes em uma tela de acesso público. Com isso, a rede interativa de agentes é completamente conexa e todas as interações são idênticas. Com este modelo, parte dos nossos resultados indicam a emergência de inteligência coletiva, onde relacionamos como padrões de comunicação e estruturas dos problemas cripto aritméticos influem na performance do grupo em encontrar suas soluções.

Referências:

1 DEL SANTO, F.; GISIN, N. Physics without determinism: alternative interpretations of classical physics. **Physical Review A**, v. 100, n. 6, p. 062107-1-062407-9, Dec. 2019. 2 SETHNA, J. P. Entropy, order parameters and complexity. **Complexity**, v. 2, n. 14853, p. 15-19, 2011. 3 REIA, S. M.; AMADO, A. C.; FONTANARI, J. F. F. Agent-based models of collective intelligence. **Physics of Life Reviews**, v. 31, p. 320-331, Dec. 2019. DOI: 10.1016/j.plrev.2018.10.004.

PG33

Superradiance, superabsorption and radiation-matter excitation interplay.

DOURADO, R. ; YOUSSEF, M.

rad.univasf@gmail.com

A superradiant pulse emitted by a sample of two-level atoms (1) can be combined with an equally fast absorption cycle in order to increase the speed of the excitation interplay. We showcase this with two different interactions, first by implementing a time-dependent multi-modal linear pumping to restore the energy of the system (2), second, we couple the sample of atoms with a single mode of the electromagnetic field (3) in the good cavity regime. For both situations the mean-field approximation was used to obtain a unitary evolution for the system for the transient regime, for the first case, we were able to solve the TD non-linear Hamiltonian exactly using the Lewis and Riesenfeld method, for the second case we obtain a quantum master equation in the Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad form and solved it numerically. We observe that the higher the number of atoms on the sample the higher will be the frequency of the interplay and a comparison with the Jaynes-Cummings model is made to show that. These results show that many-particle effects can be used to enhance desirable features of a system such as the frequency or the intensity peak.

Referências:

1 MIZHARI, S. S. May the atomic superradiant emission be described by a single-particle mean-field Hamiltonian? **Physics Letters A** , v. 144, n. 6-7, p. 282-286, 1990. 2 LORENZEN, F. *et al* . Quantum system under the actions of two counteracting baths: a model for the attenuation-amplification interplay. **Physical Review A** , v. 80, n. 6, p. 062103-1-062103-9, 2009. 3 TEMNOV, V. V.; WOGGON, U. Superradiance and subradiance in an inhomogeneously broadened ensemble of two-level systems coupled to a low-Q cavity. **Physical Review Letters** , v. 95, n. 24, p. 243602-1-243602-4, 2005.

PG34

Representação e caracterização de circuitos amplificadores operacionais através de grafos

MIRANDA, W. M. ; COSTA, L. D. F.

willianmulia@usp.br

Grafos e redes complexas tem sido largamente aplicados nas mais variadas áreas científicas e tecnológicas. (1) No ramo da eletrônica, existe uma grande variedade de circuitos eletrônicos amplificadores, sendo muitos desses com funções similares ou complementares. Tomando-se como base que circuitos eletrônicos (digitais e analógicos) podem ser representados por grafos e que também podem apresentar padrões redes complexas do tipo pequeno mundo ou “small world” quando devidamente representados (2), a pesquisa em questão busca desenvolver uma ferramenta computacional que auxilie na criação de grafos baseados em imagens de esquemas eletrônicos de circuitos amplificadores em geral, e que possua um formato de saída compatível para bibliotecas, visualizadores e interpretadores de grafos como, por exemplo, a biblioteca “iGraph”. Como objetivo complementar, a pesquisa também busca representar vários circuitos amplificadores (no nível de componentes eletrônicos), por meio de grafos advindos da ferramenta computacional desenvolvida, que servirão de base para o estudo com medidas específicas, com finalidade de identificar, posteriormente, possíveis agrupamentos quais poderão auxiliar na identificação dos parâmetros específicos em cada rede ou circuito. Com isso, esperamos poder entender melhor a diversidade das medidas e dos circuitos eletrônicos utilizados, quais possuem vasta utilização atualmente.

Referências:

1 COSTA, L. F. *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, May/June 2011. 2 CANCHO, R. F; JANSSEN, C; SOLÉ R. V. Topology of technology graphs: small world patterns in electronic circuits. **Physical Review E** , v. 64, n. 4, p. 046119-1-046119-5, Sept. 2001.

PG35

Otimização da terapia fotodinâmica para tratamento do melanoma cutâneo, analisando tipos de fotossensibilizadores e associação com agentes clareadores ópticos

MARTINELLI, L. P.

leticia.martinelli@usp.br

O melanoma é o tipo mais agressivo de câncer de pele e um relevante problema de saúde devido à sua crescente incidência e pouca resposta às opções de tratamento atualmente disponíveis. Apesar de sua baixa incidência, apresenta altas taxas de mortalidade.(1) O tratamento padrão para o melanoma cutâneo ainda é a ressecção cirúrgica, muito invasiva e agressiva para o paciente, mas a radioterapia, a quimioterapia e a imunoterapia também estão sendo investigadas. Há necessidade, portanto, de desenvolver novas opções terapêuticas. A terapia fotodinâmica (TFD) é uma técnica baseada no uso de um composto denominado fotossensibilizador (FS), da luz em comprimento de onda adequado para a excitação do FS e do oxigênio presente no tecido tumoral. A reação fotodinâmica para indução da morte celular ocorre principalmente pela produção do oxigênio singleto, uma espécie altamente reativa e oxidativa.(2) No caso do melanoma cutâneo, em decorrência da alta concentração de melanina ser um dos principais absorvedores biológicos, a TFD apresenta uma pobre resposta pela grande limitação da penetração da luz no tumor. Os agentes clareadores ópticos (“Optical Clearing Agents”, OCAs) vêm sendo utilizados para minimizar a atenuação da luz nos tecidos (3), especialmente em amostras biológicas para microscopia confocal. Nossa estratégia, portanto, é encontrar um protocolo eficaz para o tratamento do melanoma cutâneo em modelo animal, utilizando a TFD associada ao clareamento óptico. Para isso serão avaliados o efeito da combinação de novos fotossensibilizadores, sendo eles nanoemulsão de indocianina verde (fornecida pelo professor Gang Zheng da Universidade University Health Network), duas ftalocianinas, sintetizadas por um aluno de pós-graduação do grupo de Óptica-IFSC e nanotubos de carbono. Além disso, o modo de aplicação dos OCAs será por um dermatógrafo com agulhas. As técnicas de análise serão imunistoquímica e histológica, bem como Tomografia de Coerência Óptica (OCT). Na primeira, serão avaliadas células viáveis após 3 e 7 dias da TFD, para os grupos com e sem os OCAs, e o OCT será utilizado durante todas as etapas experimentais, na análise do tamanho do tumor, vascularização, dano tecidual, entre outros.

Referências:

- 1 PINHEIRO, A. M. C.; FRIEDMAN, H.; CABRAL, A. L. S. V. ; RODRIGUES, H. A. Melanoma cutâneo: características clínicas, epidemiológicas e histopatológicas no Hospital Universitário de Brasília entre janeiro de 1994 e abril de 1999. **Anais Brasileiro de Dermatologia** ,v. 78, n.2,p.179–186,2003.
- 2 DOUGHERTY, T. J. *et al* . Photodynamic therapy. **Journal of the National Cancer Institute** ,v. 90, n.12, p.889–905,1998.
- 3 MILLON, S. R.;ROLDAN-PEREZ, K. M.; RICHING, K. M.; PALMER, G. M.; RAMANUJAN, N. Effect of optical clearing agents on the in vivo optical properties of squamous epithelial tissue. **Lasers in Surgery in Medicine** , v.38, n.10,p.920–927,2006.

PG36

Caracterização e avaliação das propriedades tensoativas do biossurfactante produzido pela linhagem termohalofílica *Bacillus alveayuensis* isolada de rocha de reservatório de petróleo

ARGENTIN, M. N. ; BOSSOLAN, N. R. S.

marcela.argentin@usp.br

Biossurfactantes (BS) são moléculas anfipáticas provenientes de metabolismo secundário microbiano capazes de reduzir a tensão superficial/interfacial entre líquidos, sólidos e gases ou formar emulsões estáveis, possuindo assim, uma ampla gama de aplicações industriais e ambientais.(1)Suas características físico-químicas sugerem vasta aplicação na indústria petrolífera, onde se destacam a biorremediação e os processos de recuperação de petróleo melhorada por microrganismos.(2) Neste contexto, este projeto propõe o estudo do biossurfactante produzido por **Bacillus alveayuensis**, uma linhagem bacteriana isolada de amostra rochosa de um reservatório profundo da Bacia de Campos (RJ), quanto à caracterização química, às propriedades tensoativas e à atividade antagonista. A linhagem estudada teve seu crescimento ótimo quando cultivada em Meio Mineral líquido contendo glicerol e NH_4NO_3 , com salinidade de 70 g/L de NaCl, sem agitação e à temperatura de 55 °C. Após seis dias de incubação, o biossurfactante bruto foi obtido por precipitação ácida (HCl 6M) com rendimento de 0,27 g/L, e sua atividade foi determinada pelo índice de emulsificação (E24) e pelas tensões superficiais (TS) e interfaciais (TI). Após a extração com clorofórmio, a amostra foi semi-purificada em coluna de sílica gel 60 e usada para a caracterização química. A composição de aminoácidos foi determinada por cromatografia líquida de alta eficiência, a quantificação de ácidos graxos, por cromatografia gasosa, e a estrutura química, por espectroscopia de massas. O biossurfactante apresentou um teor protéico de 7%, e cadeia de ácidos graxos com C14 a C18, com homólogo C16 como o mais abundante. A presença de cadeia de ácidos graxos juntamente a aminoácidos indica que o biossurfactante pertence à classe dos lipopeptídeos. Os espectros de massa sugerem a presença de uma série homóloga e sua relação m/z indica possível presença de surfactinas e/ou iturinas. O biossurfactante semi-purificado, em solução a 0,1%, apresentou tensão superficial de 31,8(±0,1) mN/m e interfacial de 17,63(±0,17) mN/m contra n-hexadecano. A capacidade de recuperação de óleo em meio poroso encharcado foi avaliada através da saturação de 120 g de areia com 24 mL de óleo de motor (10W40).(3) Porções de 15 g de areia saturada com óleo foram transferidas para placas de petri, seguida da adição de 20 mL de soluções de teste, sendo estas salmoura (NaCl, 5%), tergitol 100 ppm e biossurfactante semi-purificado 0,1%; os experimentos foram realizados em triplicata. As amostras foram mantidas a temperatura ambiente por 24h e, após este período, a fase aquosa foi removida e a placa foi mantida em estufa a 55 °C até peso constante. Após a secagem da areia, o óleo residual foi extraído pela lavagem com clorofórmio. Nestes primeiros ensaios, o biossurfactante apresentou uma porcentagem de recuperação, variando entre 30 e 40%, e dissolução de óleo maior do que as outras soluções testadas. Novos testes de recuperação de óleo em meio poroso serão realizados, com modificação no controle positivo, tergitol, pois a recuperação do óleo obtida inicialmente foi similar a do controle negativo (salmoura). As próximas etapas do trabalho ainda incluem a realização de testes de atividade antitumoral e antibacteriana com o biossurfactante semi-purificado.

Referências:

1 ZANOTTO, A. W.; VALÉRIO, A.; ANDRADE, C. J.; PASTORE, G. M. New sustainable alternatives to reduce the production costs for surfactin 50 years after the discovery. **Applied and Biotechnology** , v. 103, p. 8647-8656, 2019. DOI 10.1007/s00253-019-10123-7. 2 BANAT, I. M.; MAKKAR, R. S.; CAMEOTRA, S. S. Potential commercial applications of microbial surfactants. **Applied Microbiology Biotechnology** , v.53, n.5,p. 495-508, 2000. 3 URUM, K.; PEKDEMIR, T.; COPUR, M. Surfactants treatment of crude oil contaminated soils. **Journal of Colloid and Interface Science** , v. 276, n.2,p. 456-464, 2004.

PG37

piFlowMR: um protótipo baseado no modelo a fluxo de dados dinâmico, escalável, implementado em um cluster de FPGAs de baixo custo

TEIXEIRA, J. ; RUGGIERO, C. ; FERREIRA, F. ; MATIAS, P.

jtsjunior@gmail.com

Desde os anos 60 existe uma grande discussão persistente, acerca do ganho em desempenho computacional. Isso porque nesta época algumas pessoas acreditavam que seria possível o aumento indefinido na frequência do relógio dos computadores, conforme previsto empiricamente pela extrapolação da Lei de Moore. Segundo esta hipótese, como as instruções poderiam ser executadas a uma frequência mais alta, o ganho em desempenho seria apenas uma consequência do avanço na tecnologia. Entretanto, conforme pôde ser comprovado nas últimas décadas, existem diversas limitações físicas que não permitem mais um avanço significativo desta frequência (1), dentre os quais pode-se destacar o princípio da incerteza de Heisenberg, ou mesmo a dissipação da potência em calor. É possível verificar cada vez mais um crescente interesse na exploração de paralelismo para fins de ganho em desempenho computacional à mesma frequência do relógio, com relação a versões anteriores em famílias de processadores comerciais. Entretanto, a exploração deste conceito acaba ficando totalmente a cargo do programador, ou do processo de compilação, para ser realizada de forma eficiente, a fim de verificar qualquer ganho em desempenho com a adição de mais recursos computacionais. Diversos paradigmas de computação paralela foram propostos ao longo deste período, a fim de reduzir a dependência do programador para a exploração do paralelismo. Dentre tantas abordagens existentes, uma que se destaca por sua simplicidade conceitual e capacidade de exploração de grande paralelismo, é o paradigma da computação dirigida por dados. Nesta abordagem, as instruções presentes no programa que se deseja computar são ativadas para execução a partir da disponibilidade de todos os dados necessários para fazê-lo. Dessa forma, a exploração do paralelismo passa a se tornar intrínseca à estrutura da máquina, independente do algoritmo utilizado. Uma implementação desta estratégia que se destacou bastante em sua época foi a Máquina Dataflow de Manchester (MDFM), um poderoso processador baseado no modelo a fluxo de dados dinâmico, e que foi tomado como base para a criação da piFlowBW, proposta pelo presente autor em sua dissertação de mestrado. Uma das principais características desta máquina é a fina granularidade de seu conjunto de instruções, que garante uma grande capacidade para exploração de paralelismo.(2) Porém, a estrutura da arquitetura acaba dependendo de uma grande quantidade de recursos lógicos para lidar com essa capacidade. Dessa forma, o presente projeto tem a finalidade de propor e implementar uma arquitetura de fluxo de dados levemente inspirada na MDFM que demos o nome de piFlowMR. Ela consiste em distribuir os recursos lógicos necessários em múltiplas instâncias da piFlowBW (3), permitindo um pequeno aumento na granularidade da máquina, por aglutinação de instruções. Para a operação no Multianel, a estrutura construída teve de ser totalmente revisada, contando atualmente com diversas operações de otimizações, que tem a finalidade de garantir o melhor desempenho possível, uma vez que diversos gargalos de comunicações já eram esperados, ainda na concepção deste projeto. Essa construção proposta se mostrou capaz de descentralizar as instruções dos programas, removendo quaisquer sobrecargas de instruções nos recursos de cada anel desta estrutura.

Referências:

1 MARKOV, I. Limits on fundamental limits to computation. *Nature* , v. 512,n.7513, p. 147–54,

2014. 2. GURD, J. R. The Manchester dataflow machine. **Computer Physics Communications** , v.37, n. 1, p. 49–62, 1985. 3 BARAHONA, P. M. C. C.; GURD, J. R. Processor allocation in a multi-ring dataflow machine. **Journal of Parallel and Distributed Computing** , v. 3, n.3,p. 305–327, 1986.

PG38

Solid-state NMR on quadrupolar low gamma nucleus ^{25}Mg : applications to glasses

DAMASCENO, H. R. ; ECKERT, H.

damasceno.hr@ifsc.usp.br

Magnesium (Mg) is a highly significant critical element in the solid-state science of technologically important materials. (1) In particular, Mg is a well-known additive in oxide glasses, enhancing their crack resistance and mechanical stability and modifying their bioactive properties. The structural role of Mg in glasses has been subject to some controversy. While some authors consider Mg as a regular network modifier, other studies view Mg to be integrated in the network as doubly charged MgO_4^{2-} species. NMR studies of this issue have been handicapped by the low overall detection sensitivity. Mg has a single NMR-active isotope with low natural abundance (10%), featuring a nuclear spin of 5/2 and a rather low gyromagnetic ratio of $\gamma = -1.639 \times 10^7 \text{ rad s}^{-1} \text{ T}^{-1}$. Owing to its relatively low Larmor frequency, which is only 6 % that of protons at the same magnetic field strength (2), and fairly strong quadrupolar interactions NMR studies have been limited to date. The problem is compounded by serious acoustic ringing problems commonplace at low frequencies. (3) We have been able to overcome these problems by studying 99% isotopically enriched material. The spectra were recorded at 14.1 T using a Bruker AVANCE Neo 600 MHz spectrometer operated at 20 kHz magic angle spinning speed. We characterized five different ^{25}Mg enriched silicate and aluminosilicate glasses along with some crystalline model compounds at natural abundance. Besides chemical shift spectroscopy, we are exploring the potential of studying homonuclear $^{25}\text{Mg} - ^{25}\text{Mg}$ magnetic dipole-dipole coupling using static spin echo decay spectroscopy. Based on these results, and complementary ^{27}Al and ^{29}Si MAS-NMR data, we develop a structural model for these glasses.

Referências:

1 FREITAS, J. C. C.; SMITH, M. E. Recent advances in solid-state ^{25}Mg NMR spectroscopy. *In* : WEBB, G. A. (ed.) **Annual reports on NMR spectroscopy** . Amsterdam: Elsevier, 2012. v. 75, cap. 2, p. 25-114. 2 HARRIS, R. K. *et al* . NMR nomenclature: nuclear spin properties and conventions for chemical shifts (IUPAC recommendations 2001). **Pure Applied Chemistry** , v. 73, n. 11, p. 1795-1818, 2001. 3 GEROTHANASSIS, I. P. Methods of avoiding the effects of acoustic ringing in pulsed Fourier transform nuclear magnetic resonance spectroscopy. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy** , v. 19, n. 3, p. 267-329, 1987.

PG39

Seleção de bactérias isoladas de um reservatório de petróleo brasileiro para a produção de biossurfactante: produção por diferentes substratos e avaliação das propriedades tensoativas

FERREIRA, J. D. F. ; BOSSOLAN, N. R. S.

jakeline.ferreira@usp.br

Biossurfactantes (BS) são compostos de origem microbiana que exibem propriedades surfactantes distribuindo-se em interfaces óleo/água capazes de diminuir as tensões superficiais e interfaciais. Os BS apresentam potencial de aplicação em vários setores, pois são biodegradáveis, exibem baixa toxicidade e muitos têm atividade a condições extremas de temperatura, pH e salinidades. (1) Estudos de produção de BS a partir de diferentes fontes de substratos renováveis e de baixo custo têm sido realizados, de modo a tornar atrativa sua produção comercial em larga escala. No setor da indústria petrolífera, esse tipo de composto pode ser utilizado em processos de recuperação terciária do petróleo (MEOR). O tipo e a quantidade de BS produzido são influenciados por diferentes fontes de carbono (C) e nitrogênio (N) e pela proporção C/N, além das condições de cultivo. (2) O presente trabalho buscou realizar uma triagem entre diferentes fontes de carbonos (glicose, melão, glicerina e sacarose) e de nitrogênio (nitrato de sódio, nitrato de amônio e ureia), tendo em vista otimizar as condições de produção de BS por uma linhagem bacteriana identificada como *Bacillus alveayuensis** (Ar35D5), isolada de rocha de reservatório *offshore** no Brasil, para fim de aplicação em MEOR. Ensaios prévios dos cultivos bacterianos em Meio Mineral utilizando-se alternadamente todas as fontes de C e N, na relação C/N igual a 2, foram realizados. As fontes glicerina e melão, combinadas com nitrato de amônio, e as fontes sacarose e melão, combinadas com ureia, resultaram nos melhores desempenhos em termos de crescimento e produção de BS, estas avaliadas pela densidade óptica (DO) e índice de emulsificação (E24). A partir destes quatro substratos selecionados foram realizados novos ensaios de cultivos em Meio Mineral, nas mesmas proporções (C/N=2), avaliando-se as medidas de massa seca de BS produzido, medidas de E24 e medidas da tensão superficial, esta utilizando o tensiômetro automático (modelo Sigma 700, marca *Attension**). As culturas foram mantidas à 55°C, e nos tempos de 48, 120 e 144 horas, amostras dos cultivos foram retiradas para a realização das medidas. Os resultados mostraram que a combinação sacarose/ureia atingiu o maior valor de E24 ($66,9 \pm 2,4\%$), seguida da combinação melão/ureia ($E24 66,7 \pm 1,4\%$), ambas nos tempos de 144h. O rendimento de BS produzido foi de 0,164 g/L para as fontes melão/ureia no t 120h, e de 0,144 g/L no t 144h para as fontes sacarose/ureia. O maior valor reducional de TS foi observado na combinação sacarose/ureia: 38,6 mN/m, no t 120h. Os resultados revelaram que a linhagem Ar35D5 foi capaz de produzir BS a partir de fontes de C de baixo custo e suportar condições extremas para sua produção, fato que favorece sua utilização em MEOR. As próximas etapas previstas são: (a) alterar as relações proporcionais das fontes C/N (sacarose/ureia), por meio de planejamento fatorial, tendo em vista maximizar o desempenho da produção de BS; (b) avaliar a estabilidade do BS produzido quanto às suas propriedades tensoativas, quando exposto a diferentes intervalos de pH, temperatura e salinidade.

Referências:

1 NITSCHKE, M.; PASTORE, G. M. Production and properties of a surfactant obtained from *Bacillus subtilis* grown on cassava wastewater. **Bioresource Technology**, v. 97, n. 2, p. 336-341, Feb. 2006.

2 GEETHA S. J.; BANAT, I. M.;, JOSHI, S. J. Biosurfactants: production and potential applications in microbial enhanced oil recovery (MEOR). **Biocatalysis and Agricultural Biotechnology** , v. 14, p. 23-32, Apr. 2018.

PG40

Dinâmica de fluídos computacional integrada com imagem por ressonância magnética para simulações petrofísicas e fisiológicas

SOLCIA, G. ; FOERSTER, B. U. ; ANDREETA, M. ; BONAGAMBA, T. J. ; PAIVA, F. F.

gustavo.solcia@usp.br

Com o aumento da capacidade de processamento dos computadores, a Dinâmica de Fluidos Computacional (DFC) surgiu como um novo método de estudo fluidodinâmico. Atualmente, a DFC vem sendo aplicada em áreas além da indústria automotiva e aeronáutica. Apesar da desvantagem em relação à resolução quando comparado à tomografia por Raios-X, por exemplo, o sinal das Imagens por Ressonância Magnética (IRM) é definido pelo fluido permeante e abre a possibilidade da implementação da DFC em petrofísica e fisiologia. O objetivo deste trabalho é aproveitar as propriedades da IRM para construir um domínio tridimensional que servirá como meio para simulações em wormholes e artérias cerebrais. Os sistemas foram escolhidos por possuírem similaridades estruturais em tortuosidade e ramificação. As imagens dos wormholes foram adquiridas utilizando sequências PSIF em um sistema de imagens de 2T, enquanto as angiografias arteriais foram obtidas de um banco de dados.(1) O tratamento das imagens foi feito em Python enquanto as simulações da DFC foram feitas utilizando OpenFOAM.(2) Para os wormholes, foi possível aplicar uma série de gradientes de pressão capazes de apontar a evolução de sua vazão em diferentes geometrias. Assim correlaciona-se os fatores de criação do wormhole com seu rendimento. Já nas artérias, além de simular uma situação saudável, fomos capazes de emular os efeitos de uma obstrução da artéria basilar. Assim, nossos resultados demonstram como a IRM pode ser um método não invasivo fundamental tanto na predição de rendimento em meios porosos quanto em análises paciente-específicas.

Referências:

1 YU,S. **Magnetic resonance angiography atlas dataset** .2017. Disponível em: <https://www.nitrc.org/projects/icbmmra/>. Acesso em: 28 set.2020. 2 WELLER, H. G.;TABOR,G.; JASAK, H.; FUREBY, C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. **Computers in Physics** , v. 12, n.6,p.620–631,1998.

PG41

Não-markovianidade, transições de fase e darwinismo quântico

MARTINS, W. ; SOARES-PINTO, D. O.

wilson.santana.martins@usp.br

A markovianidade para sistemas clássicos pode traduzir-se na simples fatoração da probabilidade de um dado caminho estocástico, que tem a forma $P(x_n, t_n | t_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_0, t_0) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$, em que o sistema toma valores x_n nos instantes t_n , naturalmente. O modo que as probabilidades condicionais assumem vão influenciar diretamente no fluxo de informação do sistema, que decrescerá monotonicamente na condição de markovianidade. Outra consequência importante da markovianidade é a divisibilidade dos mapas de transição que, para a mecânica quântica, poderia significar a divisibilidade dos mapas CP na forma $\Phi_{t_2,0} = \Phi_{t_2,t_1} \circ \Phi_{t_1,0}$, sendo $t_2 \geq t_1 \geq 0$. O que ocorre é que essa simples extrapolação não se verifica; em alguns sistemas os mapas CP não são divisíveis em nenhum ponto e ainda temos decrescimento monotônico de informação. Essa distinção é necessária, pois chamaremos aqui não-markovianidade como retorno da informação para o sistema - quando olhamos para a sua dinâmica reduzida, ou seja $\rho_s(t) = \text{tr}_\varepsilon[U(t)\rho_S(0) \otimes \rho_\varepsilon(0)U^\dagger(t)]$, em que ρ_S é o operador densidade do sistema e ρ_ε o operador densidade do ambiente, e $U(t)$ um operador de evolução unitária- em algum instante (ou intervalo) de tempo, como é já tradicional na área. Partindo de sistemas de *spin*, que representam o ambiente no qual o sistema analisado se acopla, a referência (1) relaciona a decoerência com a criticalidade a partir dos zeros da função de partição (os zeros de Yang-Lee). Não obstante, para a não-markovianidade, a referência (2) apresenta uma situação onde apenas no ponto crítico da transição de fase, onde as correlações são arbitrariamente persistentes, temos markovianidade. O que queremos é estabelecer caracterizações gerais das correspondências apresentadas anteriormente: temos realmente a dependência da não-markovianidade com as classes de universalidade/criticalidade? Em quais condições? Para tentar "amarrar" tais perguntas e respondê-las, vamos recorrer a uma importante ferramenta (ou fenômeno) discutida no artigo: (3) o Darwinismo Quântico. Um sistema quântico qualquer, ao interagir com o meio ambiente, emaranha seus graus de liberdade deixando o seu "rastro". Em vista de reconstruir a informação do sistema, essa abordagem se baseia em olhar para várias cópias do ambiente a fim de gerar redundância suficiente para a descrição completa do estado do sistema, ou seja, obtermos a emergência de uma descrição clássica. Aqui, ao invés de abordarmos a decoerência, isto é, a perda de informação do sistema ao analisarmos a sua dinâmica reduzida a partir do traço parcial, olharemos cópias do ambiente, onde ocorrem fenômenos como criticalidade e o embaralhamento de informação, como já tratamos anteriormente. Então, a proposta pode ser resumida como a seguinte: investigaremos a correspondência entre a classe de universalidade e a não-markovianidade, visando desenvolver suas dependências e independências, tendo como ferramenta a abordagem proveniente do Darwinismo quântico, que nos garante uma visão para o que está ocorrendo no ambiente no qual o sistema interage.

Referências:

1 WEI, B.-B.; LIU, R.-B. Lee-Yang zeros and critical times in decoherence of a probe spin coupled to a bath. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 18, p. 185701-1-185701-5, Oct. 2012. 2 HAIKKA, P. *et al*. Non-Markovianity, Loschmidt echo, and criticality: a unified picture. **Physical Review A**, v. 85, n. 6, p. 060101(R)-1-060101(R)-4, June 2012. 3 BLUME-KOHOUT, R.; ZUREK, W. H. Quantum Darwinism: entanglement, branches, and the emergent classicality of redundantly stored

quantum information. **Physical Review A** v. 73, n. 6, p. 062310-1-062310-21, June 2006.

PG42

Produção e caracterização de nanocelulose obtida a partir de resíduos celulósicos utilizando enzimas ativas em carboidratos complexos

CORTEZ, A. ; POLIKARPOV, I.

anelysecortez@usp.br

A celulose é um biopolímero de origem natural e um dos mais abundantes encontrado na natureza.(1) Obtidas a partir da desconstrução das fibras de celulose, a nanocelulose apresenta propriedades com grande interesse científico e tecnológico como hidrofiliabilidade, capacidade de modificação química, elevada rigidez, elevada resistência a tração, translucidez, entre outras.(2) Uma das principais fontes para a obtenção da celulose é a biomassa lignocelulósica, que é matéria orgânica proveniente de fontes vegetais ou resultante do seu processo. O Brasil é o maior produtor mundial de cana-de-açúcar, o que torna esta fonte atrativa para a produção de materiais de alto valor agregado, como a nanocelulose. Neste trabalho, o bagaço de cana-de-açúcar será utilizado para a produção de nanofibras de celulose. Para isso, o bagaço será submetido a um pré-tratamento através do método de polpação organossolve, seguido por uma etapa de branqueamento para reduzir as quantidades dos componentes não celulósicos da biomassa, como lignina e hemicelulose. Em seguida, nanofibras de celulose serão obtidas através do uso de três diferentes enzimas: a endoglucanase ThCel7B, a xilanase TcXyn10A e uma LPMO, enzima de atividade auxiliar denominada monooxigenase lítica de polissacarídeos da família AA9 (TtAA9), seguida de um tratamento com ultrassom de ponta. Resultados preliminares indicam que o pré-tratamento do bagaço foi eficiente em solubilizar os componentes não celulósicos do bagaço. Além disso, verificou-se que as enzimas utilizadas de forma simultânea possibilitaram a obtenção de nanofibras de celulose as quais serão posteriormente caracterizadas.

Referências:

1 KUMAR, M.; TURNER, S. Plant cellulose synthesis: CESA proteins crossing kingdoms. **Phytochemistry** , v. 112, p. 91-99, 2015, DOI 10.1016/j.phytochem.2014.07.009. 2 PHANTHONG, P.; REUBROYCHAROEN, P.; HAO, X.; XU, G.; ABUDULA, A.; GUAN, G. Nanocellulose: extraction and application. **Carbon Resources Conversion** , v. 1, n. 1, p. 32-43, 2018.

PG43

Excitações topológicas quânticas em condensados de Bose-Einstein spinoriais

DONATO, M. H. F. ; MUNIZ, S.

mario.donato@usp.br

O estudo dos *condensados de Bose-Einstein spinoriais* (CBES) dos últimos anos tem mostrado como essa categoria de sistemas tem muito a contribuir para discussões em diversas áreas da física, desde física *atômica* até física de *altas energias e campos*. Diferentemente do caso dos condensados de Bose-Einstein comuns, os bósons que formam os CBES possuem spin total não-nulo ($f \neq 0$) que, em associação a técnicas de aprisionamento atômico que não quebram a degenerescência dos estados de spin (tipicamente armadilhas ópticas), geram múltiplas espécies condensadas coexistentes ($2f + 1$ espécies, precisamente). Esse fato (1) é representado claramente no *parâmetro de ordem* (PO) do sistema, pois esse apresenta estrutura *vetorial*, em que cada uma de suas componentes representa uma espécie condensada (e, por sua vez, refere-se ao estado fundamental de cada estado de spin). Pela estrutura do sistema, o PO consegue descrever estados provenientes de *quebras espontâneas de simetria* por um mecanismo similar ao encontrado tipicamente em *física de altas energias*. (1) Tais estados, conhecidos na literatura como *excitações topológicas* (1), possuem propriedades simétricas e topológicas bem definidas e impressas diretamente na estrutura de spin do PO. Apesar das excitações topológicas serem muito ricas ao predizer estados únicos e não-triviais dos CBES, elas não são capazes de descrever os *estados excitados quânticos* desse sistema. Na literatura (1), existe a teoria de Bogoliubov, que é capaz de descrever esses estados excitados para o caso de um condensado uniforme. Contudo, ao tratar-se de um condensado uniforme, descarta-se todas as ricas propriedades simétricas e topológicas dos CBES. Neste trabalho (às vésperas de publicação), será apresentado um método para encontrar os estados excitados quânticos de uma excitação topológica não-trivial (aqui chamados de *excitações topológicas quânticas*) e será mostrado que a estrutura spinorial (isto é, vetorial e simétrica) do PO é impressa diretamente em tais estados.

Referências:

1 KAWAGUCHI, Y.; UEDA, M. Spinor Bose–Einstein condensates. *Physics Reports* , v. 520, n. 5, p. 253–381, 2012. . DOI: 10.1016/j.physrep.2012.07.005.

PG44

Termodinâmica de condensados de Bose-Einstein, capacidade térmica e Compressibilidade isotérmica

MARTINS, E. E. B. ; TELLES, G. D.

ed_uspi1@usp.br

Nesse trabalho foram estudados dois modelos distintos (1-3), para poder compreender melhor as características físicas de duas suscetibilidades termodinâmicas em condensados de Bose-Einstein. No primeiro modelo se iniciou com a energia total do sistema e com a densidade de número de átomos, que por sua vez permitia obter as duas suscetibilidades: capacidade térmica à volume constante e a compressibilidade isotérmica, respectivamente. No segundo modelo, além da energia total, foi estudado uma grandeza peculiar ao modelo, que era o parâmetro de pressão, permitindo obter a compressibilidade isotérmica. Considerando um dos modelos, cada suscetibilidade foi estudada inicialmente no gás ideal armadilhado e depois no gás interagente armadilhado. No que se refere a obtenção de resultados, com a capacidade térmica foi feito comparações entre modelos e com a mesma espécie de gás. Depois o mesmo procedimento, foi realizado com a compressibilidade isotérmica. Ao ser obtidos os resultados, foi concluído que o primeiro modelo está razoavelmente consistente com a geração de suscetibilidades e já o segundo modelo tem comportamentos gerais das mesmas, além de conter limitações na região de transição de fase quântica.

Referências:

- 1 SHIOZAKI, R. F. **Quantum turbulence and thermodynamics on a trapped Bose-Einstein condensate** . 2013. 139 p. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.
- 2 GROSSMANN, S.; HOLTHAUS, M. -Transition to the Bose -Einstein Condensate. **Zeitschrift für Naturforschung** , v. 50a, p. 921-930, 1995.
- 3 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein condensation and superfluidity** . New York: Oxford Science Publications, 2016.

PG45

Interaction mechanisms in chemotherapeutic drugs and biomembrane models associated with drug resistance.

SANTOS, K. F. D. ; MATERON, E. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

kevin@ifsc.usp.br

The development of intrinsic or acquired resistance to chemotherapeutic drugs by cancer cells is an important cause for the failure of chemotherapy. One strategy for studying the interaction of drugs with cells is to employ membrane models to mimic the barriers that allow for separation of organelles in the intracellular medium or a cell from the extracellular matrix. These biomembranes are essentially formed by a lipid bilayer embedded in proteins, through which the drugs need to diffuse to reach their target. The effectiveness of a drug depends on this interaction with the membrane. (1) In this work, we employ Langmuir films to simulate the membranes with the main lipids from the endoplasmic reticulum where there is a high concentration of the proteins cytochromes P450. The objective is to verify the importance the cytochromes P450 whose catalytic function can decrease the effectiveness of chemotherapy by reducing the drug bioavailability in the plasma or target site. (2) The lipids used were a mixture of 1,2 dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC), 1,2-dipalmitoyl-sn glycero-3-phosphoethanolamine (DPPE), L--phosphatidylinositol (Liver, Bovine) (PI), and Cholesterol (Chol). Preliminary results of surface pressure isotherms and Brewster angle microscopy (BAM) indicate an increasing condensing effect as the molar fraction of cholesterol is increased. The next steps will be to investigate the interaction between the membrane model and chemotherapy drugs, such as doxorubicin, and the effect of incorporating P450 cytochromes believed to participate in the mechanisms of cell resistance. We hope to obtain relevant information about the influence of cytochromes on the action of drugs and the possible molecular mechanisms responsible for the resistance of cancer cells. In addition, we expect to develop biosensors that identify the overexpression of these enzymes, which can reveal the presence of resistant cancer cells.

Referências:

1 KNOBLOCH, J. *et al* . Membrane-drug interactions studied using model membrane systems. **Saudi Journal of Biological Sciences** , v. 22, n. 6, p. 714–718, 2015. 2 DENISOV, I. G. *et al* . Structure and chemistry of cytochrome P450. **Chemical Reviews** , v. 105, n. 6, p. 2253 2277, 2005.

PG46

Descoberta de compostos novos híbridos de marinoquinolina com derivados de artemisinina como inibidores de *Plasmodium falciparum*

ZANINI, C. ; CAPITÃO, R. ; SANTO, R. ; ROQUE, C. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C.

A malária humana é uma doença causada por cinco espécies diferentes do parasito do gênero *Plasmodium* spp e transmitida pelas fêmeas do mosquito *Anopheles* spp. A forma mais grave e responsável pelo maior número de mortes é a causada pelo *P. falciparum*. As regiões do mundo mais afetadas pela malária são as tropicais e subtropicais, sendo que a África concentra 93% do número de casos mundiais. (1) Atualmente, o tratamento recomendado pela Organização Mundial de Saúde para a malária causada pelo *P. falciparum* são as Terapias de Combinação com Derivados de Artemisinina (ACTs). Esta estratégia é baseada na terapia conjunta de dois antimaláricos: um derivado de artemisinina, com ação rápida e meia vida curta, e um antimalárico de meia vida longa, que impede a recrudescência. Contudo, casos de resistência às ACTs foram registrados no Sudeste asiático¹ e parasitos apresentando mutações no gene de resistência aos derivados de artemisinina foram reportados na África. (2) Portanto, é urgente a busca por novos antimaláricos eficazes e seguros. A hibridação molecular é uma técnica de desenvolvimento de novos fármacos rápida e de baixo risco, considerando que são utilizados compostos com conhecimento prévio estabelecido. Estudos realizados em nosso laboratório identificaram as marinoquinolinas como novos candidatos a fármacos antimalárico que apresentam alta potência contra diferentes cepas de *P. falciparum* e razoável tolerabilidade tanto *in vitro* quanto *in vivo*. (3) Neste trabalho, empregamos a estratégia de hibridização molecular entre derivados marinoquinolínicos e de artemisinina para a descoberta de novos candidatos a fármacos antimaláricos. Os híbridos HB02, HB03, HB04 e HB05 foram sintetizados pelo grupo do Prof. Dr. Carlos Roque da UNICAMP e avaliados em nosso laboratório. Os resultados obtidos indicaram que os compostos HB02, HB03, HB04 e HB05, apresentaram valores de IC₅₀ entre 3 e 10 nM contra as cepas 3D7 (sensível) e IPC4912 (resistente a artemisinina). Além disso, os compostos não apresentaram toxicidade contra células HepG2 (Índice de Seletividade >10). O híbrido HB04, composto representativo da série, não demonstrou resistência cruzada nos ensaios contra um painel de cepas *P. falciparum* resistentes aos antimaláricos padrões. Os derivados HB02 e HB03 foram mais potentes do que a combinação de seus compostos de origem, sugerindo que o processo de hibridação molecular foi importante para a obtenção de compostos mais potentes. Ensaios de recrudescência com a cepa 3D7 de *P. falciparum* na presença dos híbridos indicaram que os compostos HB02 e HB04 não permitiram a recrudescência dos parasitos, enquanto os híbridos HB03 e HB05 permitiram. Nossos resultados indicam que a hibridação molecular é uma estratégia atrativa para a descoberta de novas entidades químicas promissoras para o tratamento da malária.

Referências:

- 1 WHO. **World malaria report 2019**. Disponível em: <https://www.who.int/malaria/publications/world-malaria-report-2019/en/>. Acesso em: 23 mar. 2020.
- 2 UWIMANA, A. *et al*. Emergence and clonal expansion of *in vitro* artemisinin-resistant *Plasmodium falciparum* kelch13 R561H mutant parasites in Rwanda. **Nature Medicine**, p. 1–7, 2020. DOI: 10.1038/s41591-020-1005-2.
- 3 AGUIAR, A. C. C. *et al*. Discovery of Marinoquinolines as potent and fast-acting *Plasmodium falciparum* Inhibitors with *in vivo* activity. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 61, n. 13, p. 5547–5568, 2018.

PG47

Geodesic motion in a binary black-hole solution.

CAPOBIANCO, R. ; HARTMANN, B.

rogerio.capobianco@gmail.com

In Newtonian gravitational theory, a system of point charged particles can remain in static equilibrium under their mutual gravitational and electromagnetic forces, provided that for each particle the charge, e , is related to the mass, m , by $e = m$. In General Relativity this problem is described by a multi centered source free black hole (BH) exact solution of Einstein-Maxwell field equation, known as Majumdar-Papapetrou (MP) geometries, where every point particle corresponds to an extreme Reissner-Nördstrom BH. (1-2) In this research we are looking for analytical solutions of the geodesic equation of a structureless particle in a binary BH space-time described by the MP solution. Due to the symmetries of the problem, namely the axial symmetry and staticity, two cyclic variables can be found. The geodesic motion as well as circular motion is also studied.

Referências:

1 HARTLE, J. B.; HAWKING, S. W.. Solutions of the Einstein-Maxwell equations with many black holes. **Communications in Mathematical Physics** , v. 26, n. 2 , p. 87-101, 1972. 2 ASSUMPCAO, T. *et al* . Black hole binaries: ergoregions, photon surfaces, wave scattering, and quasinormal modes." **Physical Review D** , v. 98, n. 6, p. 064036, 2018.

PG48

Avaliação da interação dos curcuminóides para terapia fotodinâmica antimicrobiana em bactérias patogênicas

MELO, N. ; KURACHI, C. ; DIAS, L. ; INADA, N. M. ; SOARES, J. M.

nicolas.junhiti.melo@usp.br

O aparecimento e o acúmulo de resistências bacterianas têm resultado num quadro alarmante devido ao surgimento de várias espécies bacterianas multi-resistentes. A procura por novas terapias para combate microbiano se torna essencial, destacando-se como uma das alternativas, a terapia fotodinâmica antimicrobiana (TFDA). (1) Dentre os fotossensibilizadores naturais utilizados na TFDA, a curcumina tem despertado interesse por sua ação fotodinâmica. O uso de outros curcuminóides em ação conjunta com a curcumina pode apresentar interações que melhoram a TFDA e potencializando a morte das células bacterianas. (2) Esse projeto buscará compreender o efeito dessa interação sobre *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. Para isso serão testados os curcuminóides sintéticos isoladamente e em combinação, determinando os melhores parâmetros fotodinâmicos para concentração, dose de luz e tempo de incubação, comparando-se a inativação fotodinâmica com a curcumina natural.

Referências:

1 GHORBANI, J. *et al* . Photosensitizers in antibacterial photodynamic therapy: an overview. **Laser Therapy** , v. 27, n. 4, p. 293-302, 2018. 2 SILVA, A. P. **Novas estratégias para o diagnóstico de onicomicose e tratamento por terapia fotodinâmica** . 2017. 195 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

PG49

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

SOARES, J. M. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C.

jennifer.soares@usp.br

O presente projeto visa estudar o efeito da combinação da Antibioticoterapia (ATBT) com a Inativação Fotodinâmica (IFD), como um estudo *in vitro* de eficácia e segurança para futuras implementações em pesquisa clínica utilizando IFD como tratamento para infecções. A resistência antimicrobiana é uma das mais graves ameaças à saúde pública global deste século. (1) A IFD é uma alternativa a ATBT, tratamento padrão de infecções, pois seu mecanismo de ação permite a eliminação de células indesejáveis sem seleção bacteriana e com baixos efeitos colaterais ao paciente. (2) Foi analisado os efeitos inibitórios dos antibióticos amoxicilina, eritromicina e gentamicina, e da IFD utilizando a curcumina como fotossensibilizador em *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. Os teste de sinergia foram avaliados pelo modelo de independência de Bliss. (3) Foi obtido que dos 27 grupos combinados para cada cepa apresentaram sinergismo em 81,5% e 66,6% dos casos para *S. aureus* e *E. coli*, respectivamente. De modo geral, os resultados sugerem que a IFD potencializa o efeito dos antibiótico analisados.

Referências:

- 1 O'NEILL, J. **Tackling drug-resistant infections globally** : final report and recommendations. London: Wellcome Trust, 2016. 80 p. (Review on Antimicrobial Resistance)
- 2 LIU, Y. *et al* . Antibacterial photodynamic therapy: overview of a promising approach to fight antibiotic-resistant bacterial infections. **Journal of Clinical and Translational Research** , v. 1, n. 3, p. 140-167, 2015.
- 3 COURTNEY, C. M. *et al* . Potentiating antibiotics in drug-resistant clinical isolates via stimuli-activated superoxide generation. **Science Advances** , v. 3, n. 10, p. e1701776-1-e1701776-10, 2017.

PG50

Investigação de uma LPMO9 de *Thermothelomyces thermophilus*: região-especificidade e ativação por luz.

HIGASI, P. M. R. ; VELASCO, J. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; ARAÚJO, E. A. D. ; BRIGANTI, L. ; FRANÇA, B. A. ; KELLER, M. ; SEGATO, F. ; BLOSSOM, B. M.

paulahigasi@ifsc.usp.br

Mono-oxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs) foram inicialmente identificadas por aumentarem a atividade de hidrolases e, portanto, têm importante valor comercial. Atualmente, sabe-se que LPMOs possuem um íon cobre em seu sítio catalítico, e na presença de O₂ ou H₂O₂, assim como na de um doador de elétrons (pequenas moléculas ou outras enzimas), é capaz de quebrar cadeias polissacarídicas, gerando extremidades oxidadas nos carbonos C1 ou/e C4. (1) O fungo ascomiceto *T. thermophilus* possui em seu genoma 54 genes codificantes para oxidoredutases que atuam em carboidratos, incluindo 31 genes para LPMOs. (2) Apesar dos avanços feitos na última década, muitos aspectos das LPMOs ainda são desconhecidos, incluindo a real diversidade de LPMOs, o que as diferenciam, sua atividade no contexto biológico, seu mecanismo de ação. Neste trabalho, o gene para uma LPMO de *T. thermophilus* foi clonado e expresso em *A. nidulans*. A enzima produzida, TtLPMO9H, pertence à família AA9 de enzimas de atividade auxiliar do banco de dados de enzimas ativas em carboidratos. TtLPMO9H se mostrou termoestável, e essa característica pode ser usada para tratar a preparação enzimática e inativar hidrolases (celulases) produzidas pelo fungo hospedeiro usado na produção de TtLPMO9H. Através do ensaio com 2,6-dimetilfenol (2,6-DMP), que mede atividade de peroxidase da LPMO, foi mostrado que TtLPMO9H tem maior atividade em pHs básicos, mas é rapidamente inativada, enquanto em pH 5.0, comum para celulases, a atividade foi baixa. Produtos da atividade de TtLPMO9H em Avicel (celulose cristalina) foram determinados por cromatografia aniônica de alta performance com detecção amperométrica pulsada. TtLPMO9H produziu celo-oligossacarídeos solúveis com oxidações nos carbonos C1 e C4. Como o ensaio com 2,6-DMP indicou, a maior atividade (maior quantidade de produtos) foi detectada em reações conduzidas em pH 7.0, comparada a em pH 5.0. A atividade da TtLPMO9H aumentou quando as reações foram feitas com adição do fotopigmento clorofilina, e sob luz branca. A catálise com clorofilina e luz resultou em ganho de 2.7x em reações em pH 7.0, e de quase 5x em reações em pH 5.0. TtLPMO9H potencializou a ação de endoglucanases em Avicel, sendo especialmente benéfica em conjunto com uma endoglucanase da família GH7 na liberação de açúcares redutores. O envelope molecular foi determinado por espalhamento de raios-X em baixo ângulo, e mostrou a natureza modular da TtLPMO9H, com domínio catalítico e CBM1, conectados por linker glicosilado.

Referências:

1 BISSARO, B. *et al* . Oxidative cleavage of polysaccharides by monocopper enzymes depends on H₂O₂. **Nature Chemical Biology** , v. 13, p. 1123-1128, Oct. 2017. 2 BERKA, R. M. *et al* . Comparative genomic analysis of the thermophilic biomass-degrading fungi *Myceliophthora thermophila* and *Thielavia terrestris*. **Nature Biotechnology** , v. 29, n. 10, p. 922-929, Oct. 2011.

PG51

Bioestimulação de sementes de soja com luz de comprimento de onda 660 nm

ODA, Y. S. ; CASTRO NETO, J. C.

yuri.oda@usp.br

Apesar dos grandes avanços na área de aplicações químicas voltadas para a agricultura, efeitos negativos do constante uso dessas tecnologias vêm sendo reportados. (1) Em contrapartida, métodos físicos como a irradiação de luz para a bioestimulação dos fitocromos de sementes surgem como uma alternativa sustentável ao tratamento de sementes do modelo de produção atual. Fitocromos são fotorreceptores que absorvem luz no comprimento de onda correspondente à cor vermelha (660 nm) quando em sua forma inativa, e interconvertem-se de maneira reversível para a forma ativa, absorvendo luz no comprimento de onda do vermelho distante (730 nm). Devido à esses fotorreceptores, as plantas conseguem distinguir os diversos períodos do dia baseadas na intensidade e comprimento de onda da luz que recebem, direcionando seus processos biológicos de acordo com suas necessidades, como nas etapas de germinação e floração. (2) O presente projeto consiste no uso de um laser de diodo e do dispositivo Biotable (LEDs), ambos de comprimento de onda 660 nm para a bioestimulação de sementes de soja, visando observar se a irradiação de luz vermelha causa aumento na taxa de germinação das sementes e promoção de crescimento nas plantas. Para o crescimento das plantas de soja, foi construída uma estufa indoor com iluminação artificial (fotoperíodo 12h claro/12h escuro) e automação feita pelo sistema embarcado Raspberry Pi 3, responsável por controlar os equipamentos de irradiação, coletar dados de temperatura e umidade da sala a cada 15 minutos através do sensor BME280, capturar imagens para a criação de TimeLapses do crescimento das plantas através do módulo RaspiCam e controlar a válvula solenóide do sistema de irrigação por gotejamento. Além disso, foi desenvolvida uma interface em NODE-RED para facilitar o controle de todos os sistemas supracitados. As sementes de soja foram submetidas à irradiação de luz vermelha em diferentes doses de luz com o laser no experimento de germinação em rolo germitest, no qual a dose de luz 1.6 J/cm^2 com o laser aumentou em 5.5% a taxa de germinação das sementes quando comparado com o controle (sem irradiação). Em seguida, foi realizado um experimento de cultivo na estufa construída no qual as sementes foram tratadas com as mesmas doses de luz com o laser, semeadas em vasos contendo substrato (quatro repetições para cada tratamento) e dispostas para crescimento durante 30 dias. Ao fim deste período, foram aferidos os parâmetros altura, teor de clorofila, massa fresca e massa seca da parte aérea e da raiz. Apesar de os valores aferidos não apresentarem diferença significativa no teste de Tukey a 5% de significância devido ao valor alto para o desvio padrão, a dose 1.6 J/cm^2 causou aumento de 21% da massa fresca da parte aérea e 9.4% da massa seca, enquanto a dose 0.8 J/cm^2 causou aumento de 54% da massa fresca da raiz e 9% da massa seca, ambas as condições comparadas com o controle. Como próximos passos, serão exploradas doses de luz nas vizinhanças das condições 0.8 e 1.6 J/cm^2 e o número de repetições no experimento de cultivo será ampliado.

Referências:

1 VASILEVSKI, G. *et al* . Perspectives of the application of biophysical methods in sustainable agriculture. **Bulgarian Journal of Plant Physiology** , v. 29, n. 3/4, p. 179-186, 2003. 2 HERNANDEZ, A. C. *et al* . Laser in agriculture. **International Agrophysics** , v. 24, n. 4, p. 407-422, 2010

PG52

Excitações magnéticas em magnetos frustrados inomogêneos

ALMEIDA, I. C. D. ; ANDRADE, E.

igor.almeida@ifsc.usp.br

Em sólidos reais, sempre há um grau de desordem, a qual advem de impurezas, vacâncias ou defeitos. Essa desordem dá origem a fenômenos físicos interessantes e relativamente pouco explorados. Nesse trabalho, estudaremos o efeito da desordem em dois diferentes modelos, separando nossa pesquisa em duas partes. Como a segunda parte da pesquisa, que se refere ao modelo de Hubbard desordenado, ainda está no início, falaremos apenas da primeira parte nesse resumo. Na primeira parte, estudamos o comportamento clássico, a temperatura zero, do modelo de Heisenberg antiferromagnético frustrado $J_1 - J_2$ na rede quadrada. Esse modelo, para $J_2 < 0.5$, apresenta ordem de Néel, enquanto para $J_2 > 0.5$ há um desacoplamento das duas sub-redes, dando origem a um estado fundamental macroscopicamente degenerado, com simetria $O(3) \times O(3)$. Na presença de flutuações quânticas ou térmicas, emerge o mecanismo de ordem por desordem (1), o qual levanta tal degenerescência, selecionando estados de "listras" que quebram agora uma simetria $O(3) \times Z(2)$. Em virtude dessa simetria discreta, a rede pode ser mapeada em um modelo de Ising 2D, o qual possui uma transição de fase de segunda ordem em temperatura finita. Na presença de desordem nas ligações, a fase de listras é totalmente suprimida. Para baixas concentrações de desordem, a ordem induzida localmente é a ordem anticolinear, onde as sub-redes formam um ângulo de 90° de um modo tal que a quiralidade em cada plaqueta seja bem definida. Há também um *canting* local que é o responsável pela economia de energia. Essa distorção cai de modo dipolar, e o resultado de E. Andrade, M. Vojta e S. Dey (2) sugere que a ordem anticolinear não sobreviva a uma concentração finita de defeitos que induzam uma distorção dessa forma, mesmo a temperatura zero. Tal resultado foi corroborado pelas nossas simulações. Se a desordem nas ligações for apenas em uma direção, ocorre uma quebra explícita de simetria no problema. Tal quebra induz uma ordem não-coplanar que invade uma parte da região do diagrama de fases a $T=0$ no qual a fase é Néel sem a presença de desordem. A desordem tipo "vacância" induz também a ordem anticolinear com *canting*, embora a distorção seja quadrupolar. A princípio, a ordem sobreviveria a distorções do tipo. Entretanto, descobrimos que um par de vacâncias vizinhas entre si induzem uma distorção dipolar. Como uma concentração finita de vacâncias implica uma concentração menor, mas também finita, de vacâncias vizinhas, não pode haver ordem de longo alcance nesse caso.

Referências:

1 HENLEY, C. L. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 17, p. 2056–2059, 1989. 2 DEY, S.; ANDRADE, E. C.; VOJTA, M. Destruction of long-range order in noncollinear two-dimensional antiferromagnets by random-bond disorder. **Physical Review B**, v. 101, n. 2, p. 020411, 2020 3 LECHERMANN, F.; GEORGES, A.; KOTLIAR, G.; PARCOLLET, O. Rotationally invariant slave-boson formalism and momentum dependence of the quasiparticle weight. **Physical Review B**, v. 76, n. 15, p. 155102, 2007.

PG53

Estudos biofísicos e estruturais das septinas de *Drosophila melanogaster*

FERNANDES, A. ; CABREJOS, D. A. L. ; PEREIRA, H. D. ; GARRATT, R. C.

adriano.fernandes@usp.br

As septinas são proteínas conhecidas originalmente por atuarem na formação do septo, estrutura responsável pelo estrangulamento no final da divisão celular e que separa em duas partes o conteúdo citoplasmático. (1) Septinas também possuem diversas outras funções celulares, sendo encontradas em fungos e animais, e ausentes em plantas. Apresentam como principais características um domínio conservado de ligação aos nucleotídeos de guanina (GTP/GDP) e a formação de filamentos homo- e hetero-oligoméricos, que são estruturas altamente organizadas. As septinas estão envolvidas em diversas funções celulares nas quais encontram-se associadas à membrana plasmática, através do reconhecimento de fosfolípidos específicos pela região polibásica (hélice-0). (1) Outros processos biológicos também são associados às septinas, como a citocinese, exocitose, fagocitose, tráfego de vesículas. O principal aspecto das septinas reside na sua polimerização, fato que promove a formação de complexos heteroligoméricos altamente organizados, que podem resultar em estruturas do tipo filamentos, anéis e redes. Para os estudos de septinas deste trabalho foi escolhido como organismo modelo *Drosophila melanogaster*, ou mosca-da-fruta, que é uma espécie de inseto díptero. Esta espécie possui cinco genes codificantes às septinas Sep1, Sep2, Sep4, Sep5 e Pnut. (2) Apesar do conhecimento dos genes relativos às septinas de *Drosophila melanogaster*, ainda há carência em estudos da formação de complexos entre as proteínas que formam filamentos e/ou interactoma dessas moléculas, bem como em informações estruturais de alta resolução. (3) Neste estudo foram investigados parâmetros biofísicos destas septinas em solução, bem como avaliada a formação dos dímeros Sep1.Sep2 e Sep4.Sep2. Além disto, foram realizadas modelagens computacionais por homologia a fim de investigar os aminoácidos fundamentais para a formação de complexos. Este estudo visa uma maior compreensão do mecanismo de interação das septinas de *Drosophila melanogaster* bem como a elucidação de suas informações estruturais por técnicas de caracterização biofísica e cristalografia de proteínas por difração de raios-X.

Referências:

1 HARTWELL, L. H.; CULOTTI, J.; REID, B. Genetic control of the cell-division cycle in yeast. I. detection of mutants. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 66, n. 2, p. 352-359, 1970. 2 NEUFELD, T. P.; RUBIN, G. M. The drosophila peanut gene is required for cytokinesis and encodes a protein similar to yeast putative bud neck filament proteins. **Cell**, v. 77, n. 3, p. 371-379, 1994. 3 ADAM, J. C.; PRINGLE, J. R.; PEIFER, M. Evidence for functional differentiation among drosophila septins in cytokinesis and cellularization. **Molecular Biology Cell**, v. 11, n. 9, p. 3123-3135, 2000.

PG54

Reconstruction of complex networks from causal information: analyzing, identifying, and distinguishing dependencies

MARTINELLI, T. ; SOARES-PINTO, D. O. ; RODRIGUES, F. A.

The big data era advanced the possibility to understand emergent phenomena in the real world often occurred by systems with multiple, non-trivial interactions. One of the main questions for these complex systems is to understand how their organization, represented by large networks, influences the dynamical processes. Although, such a study is fundamental to develop politics of controlling dynamical processes from changes in the network structure, in practice, the only information available is data recorded from variables with unknown topology. Such a scenario can be explored by the use of artificial intelligence tools to quantify individuals' causal influence and to infer a link among them, thus, reconstructing the underlying network. (1) In other words, we can make reverse engineering to obtain a causal graphical model via data. Therefore, the objective of our work resided in the reconstruction of complex networks from time-series data by extracting available causal information. Specifically, the study aimed to improve the state of the art causal discovery algorithms. These algorithms suffer by the lack of considering context-dependent causes when connecting links, costing a spuriously embellished view of the organization of complex systems. (2-3) To overcome it, the student is proposing new techniques based on the foundations of multivariate information theory. The net result is an update of the well-known discovery algorithms which detect and isolate sophisticated causal influences in the reconstructed causal network undetected so far.

Keywords: Causality theory. Network science. Informational analysis.

Referências:

1 PEARL, J. **Causality** : models, reasoning and inference. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. 2 JAMES, R. G.; BARNETT, N.; CRUTCHFIELD, J. P. Information flows? a critique of transfer entropies. **Physical Review Letters** , v. 116, n. 23, p. 238701, 2016. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.238701. 3 RUNGE, J. Causal network reconstruction from time series: from theoretical assumptions to practical estimation. **Chaos** : an interdisciplinary journal of nonlinear science, v. 28, n. 7, p. 075310, 2018. DOI: 10.1063/1.5025050.

PG55

Desenvolvimento e implementação de métodos de processamento de imagens por ressonância magnética (RM) para obtenção de parâmetros relacionados à perfusão e à difusão

COELHO, B. S.

breno.spinelli200@gmail.com

INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA: Para identificar enfermidades dos tecidos e circulação sanguínea, aplica-se a técnica de RM chamada Movimento Incoerente Intravoxel (IVIM em inglês). (1) Seu sinal decai segundo a equação 1, onde b é a ponderação de difusão; $S(b)$, o sinal adquirido; S_0 , o sinal quando $b = 0$ s/mm²; D e D^* , os coeficientes de difusão pura e de pseudodifusão, respectivamente; e f , a fração de perfusão. (2) Com o sinal de vários valores de b , estratégias de fitting calculam f , D e D^* , que refletem a integridade do órgão analisado. Esta técnica é não-invasiva e tem resultados promissores no monitoramento de doenças, porém a precisão e a acurácia no cálculo são sensíveis ao ruído. (1) A IVIM deve, por isso, ser estudada para melhorar as estimativas e expandir suas possibilidades de aplicações. $S(b)/S_0 = f.exp(-b.D) + (1 - f).exp(-b.D^*)(1)$. **OBJETIVOS:** Desenvolver uma ferramenta de processamento de dados para avaliar dados de IVIM; entender os efeitos das variações de f , D , D^* e das sequências de b no desempenho dos métodos de fitting levando em conta as distorções do ruído. **MÉTODOS:** Simulamos, em MATLAB (Mathworks, Natick, MA, EUA, R2015b), para um voxel, o sinal da equação 1 para $0 \leq f \leq 0.1$, $0 \leq D \leq 0.007$, $0 \leq D^* \leq 0.07$, $20 \leq SNR \leq 50$ e 4 (b_1, b_2, b_3, b_4) sequências de valores de b de 0 a 1000 s/mm² com diferentes tamanhos e distribuições. A b_1 tem 25 valores; a b_2 , 12; a b_3 10; e a b_4 , apenas 8. Depois, calculamos f , D e D^* com 6 métodos de fitting e analisamos os desvios entre parâmetros simulados e estimados para classificar os desempenhos de métodos e sequências. **RESULTADOS E DISCUSSÕES:** Conforme cresce o SNR, melhores são os desempenhos de todos os métodos. Os não-lineares superaram métodos que, segundo a literatura, teriam desempenho mais robusto nas estimativas. (1) A sequência b_2 tem desempenho mais satisfatório e aplicabilidade mais factível para métodos não-lineares. Já para os lineares, a sequência b_3 prevalece. Foi observado também que o fitting em duas etapas prejudicou o desempenho. A estratégia Levenberg-Marquadt combinada com b_2 proporcionou o melhor desempenho. **CONCLUSÕES:** Estudamos, até agora, a influência dos parâmetros do sinal de IVIM e do ruído no desempenho dos métodos de fitting escolhidos, dentre os quais os não-lineares foram os mais eficientes. Futuramente, simularemos, com Levenberg-Marquadt e b_2 , vários voxels que representem tecidos diferentes no estudo das dimensões e posicionamento das Regiões de Interesse (ROIs em inglês) dos exames de imagem; esta aplicação será analisada também em dados reais. Pretende-se também codificar uma interface gráfica para construção e análise de ROIs em imagens de RM.

Referências:

- 1 LE BIHAN, D. Introduction to IVIM MRI. In : BIHAN, D. L. et al. (ed.). **Intravoxel incoherent motion (IVIM) MRI** : principles and applications. Boca Raton: CRC Press, 2018. cap. 1, p.3-27.
- 2 FOURNET, G.; CIOBANU, L.; LE BIHAN, D. IVIM models: advantages, disadvantages and analysis pitfalls. In : LE BIHAN, D. et al. (ed.). **Intravoxel incoherent motion (IVIM) MRI** : principles and applications. Boca Raton: CRC Press, 2018. cap. 19, p.375-402

PG56

Automatização da otimização da técnica de contraste de fase para o desenho de potenciais ópticos em tempo real

RAMPIM, A.

airton.rampim@usp.br

O século XX foi marcado por uma grande revolução em como nós compreendemos o universo. A dinâmica de sistemas atômicos apresenta uma série de características sem análogos aos sistemas macroscópicos bem descritos pela Física Clássica. Essa mudança motiva a investigação de novos sistemas que possam aprimorar a tecnologia vigente. Um exemplo disso está na área de gases atômicos ultrafrios que apresentam efeitos análogos aos circuitos eletrônicos, como o condensado de Bose-Einstein de um gás de sódio na construção de um sensor magnético altamente preciso. (1) Neste estudo, um potencial óptico em formato de anel foi construído a partir de dois feixes laser com perfil “folha” e “anel” para aprisionar o condensado. Um fato importante deste estudo foi o prolongamento do tempo de vida da corrente do condensado quando se observou o sistema com uma armadilha inteiramente óptica. Em geral, é de interesse dentro dessa área a construção de potenciais arbitrários para a possibilidade de explorar outros cenários. Isso é possível com técnicas de modulação da luz a partir de sua fase, que são mais eficientes que a modulação por sua amplitude. (2) Porém, as técnicas vigentes produzem potenciais irregulares que dificultariam tal abordagem para o aprisionamento de sistemas atômicos. Este trabalho tem como objetivo buscar técnicas computacionais de otimização visando a redução de tais irregularidades. Uma primeira abordagem adotada foi a construção de um programa que possibilita capturar o potencial formado e corrigir o padrão de fase de um modulador espacial de luz (SLM), de forma automática. Tal mecanismo de retroalimentação é possível por causa da técnica de contraste de fase de ordem zero, desenvolvida em nosso laboratório, para a modulação de fase. Os primeiros resultados são promissores e já apresentaram uma melhora significativa no perfil do potencial. Um estudo mais aprofundado na parametrização da correção de tais potenciais, explorando técnicas de aprendizagem de máquina para automatizar o processo, será realizado bem como a busca de outras técnicas de otimização que possam ser adaptadas ao problema. Eventualmente, pretende-se que esses métodos possam ser aplicados a sistemas de correção automática, em tempo real, de potenciais ópticos de controle e aprisionamento óptico.

Referências:

1 RAMANATHAN, A. *et al* . Superflow in a toroidal Bose-Einstein condensate: an atom circuit with a tunable weak link. **Physical Review Letters** , v. 106, n. 13, p. 130401, 2011. 2 BAÑAS, A.; GLÜCKSTAD, J. Light shaping with holography, GPC and holo-GPC, **Optical Data Processing and Storage** , v 3, n.1, p. 20-40, 2017.

PG57

Phenomenology of the propagation of astroparticles: Lorentz invariance violation and local sources of UHECR

LANG, R. G. ; SOUZA, V. D.

rodrigo.lang@usp.br

In this work, the phenomenology of the propagation of astroparticles is discussed. It is divided in two main parts. Firstly, we discuss the possibility of testing Lorentz invariance violation (LIV) in the propagation of astroparticles. Imprints of LIV are searched in the most recent gamma-ray and ultra-high energy cosmic ray (UHECR) data. For gamma-rays, a new robust technique is presented and current limits on the literature are significantly improved. (1) The potential of testing LIV with the new generation of experiments, the Cherenkov Telescope Array (CTA) is estimated. For UHECR, we discuss the possibility of using upper limits on the GZK photon flux for testing LIV and for the first time we discuss the dependency of such technique on the models for the UHECR sources. (2) We also perform for the first time a combined fit of the spectrum and composition data from the Pierre Auger Observatory considering LIV. In the second part, we discuss the importance of local sources of UHECR. The combined effects in the spectrum of a distance to the nearest UHECR and turbulent extragalactic magnetic fields is studied. A new robust and fast semianalytical method for the propagation of UHECR in such environments is proposed and limits on the maximum distance to the nearest source are imposed. (3) The influence of local sources in the dipole of the angular distributions is also studied.

Referências:

1 LANG, R. G.; H. MARTÍNEZ-HUERTA, H.; SOUZA, V. Improved limits on Lorentzinvariance violation from astrophysical gamma-ray sources. **Physical Review D** , v. 99, n. 4, p. 043015, 2019. DOI:10.1103/PhysRevD.99.043015. 2 LANG, R. G.; MARTÍNEZ-HUERTA, H.; SOUZA, V. Limits on the Lorentzinvariance violation from UHECR astrophysics. **Astrophysical Journal** , v. 853, n. 1, p. 23, 2018. DOI:10.3847/1538-4357/aa9f2c. 3 LANG, R. G.; TAYLOR, A. M.; AHLERS, M.; SOUZA, V. Revisiting the distance to the nearest UHECR source: effects of extra-galactic magnetic fields. **Physical Review D** , v. 102, n. 6, p. 063012, 2020. DOI:10.1103/PhysRevD.102.063012.

PG58

Theranostics nanomaterials coated with cell membrane for nanomedicine applications

LINS, P. M. P. ; RIBOVSKI, L. ; CORSI, L. ; ZUCOLOTTO, V.

ppincela@gmail.com

Plasmonic nanoparticles have been applied as photothermic agents in nanomedicine, for cancer therapy. Gold nanorods (GNRs), in particular, have gained attention due to their optical-electronic properties and chemical stability. (1) The successful application of nanomaterials in medicine depends on their blood circulation time, as well as on their accumulation in the target tissues, factors strictly related with the ability of the nanoparticles to evade the immune system. To increase the therapeutical efficiency of GNRs, these materials had been coated with endogenous biomolecules capable of making them imperceptible to the host immune responses. (2) Here we developed a multifunctional system that uses macrophage-derived membranes or isolated extracellular vesicles (EVs) to encapsulate the GNRs, allowing the exploration of their optical properties without stimulating the immune system. We describe the functionalization of gold nanorods with EVs or cell-derived membranes, and their interaction with leukemic macrophage (RAW264.7, source cell), breast cancer (4T1) and healthy fibroblasts (L929) cells. Our results revealed a preferential interaction of EV-nanorods in the source cell and also that the coating prevented the internalization when compared to citrate-covered gold nanorods. However, the camouflage was inefficient to prevent macrophage cell death, probably due to their known toxicity related to asymmetry. (3) Therefore, we highlight the differences of EVs- and cell membrane-coated GNRs, and their use as therapeutical agents.

Referências:

1 WANG, L. *et al* . Selective targeting of gold nanorods at the mitochondria of cancer cells: implications for cancer therapy. **Nano Letters** , v. 11, n. 2, p. 772–780, 2011. 2 PARODI, A. *et al* . Synthetic nanoparticles functionalized with biomimetic leukocyte membranes possess cell-like functions. **Nature Nanotechnology** , v. 8, p. 61–68, 2012. DOI: 10.1038/nnano.2012.212. 3 FERNANDO, D.; SULTHANA, S.; VASQUEZ, Y. Cellular uptake and cytotoxicity of varying aspect ratios of gold nanorods in HeLa cells. **ACS Applied Bio Materials** , v. 3, n. 3, p. 1374–1384, 2020.

PG59

Reconstrução de perfis longitudinais de chuueiros atmosféricos a partir de medições de luz Cherenkov.

GILER, A. G. D. ; SOUZA, L. V. D.

andres.delgado@usp.br

Raios cósmicos (RCs) são principalmente prótons ($\sim 90\%$) de origem cósmica que atingem a Terra. A importância de RCs está baseada na sua origem e nos mecanismos de aceleração que permitem atingir altas energias. RCs também tem uma ligação com a física de raios gama, que por meio da interação dessas partículas com o meio interestelar, dá origem à produção de fótons de energia muito alta. Tanto RCs quanto os raios gama podem interagir com os componentes da atmosfera iniciando um processo em cascata chamado chuueiro atmosférico extenso. Na região de energia entre 10^9 eV e 10^{12} eV, a principal técnica de medida são telescópios de luz Cherenkov que são capazes de medir a luz Cherenkov produzida pelas partículas de um chuueiro atmosférico. (1) Nosso objetivo é reconstruir o parâmetro X_{max} usando telescópios Cherenkov. O X_{max} é a profundidade (X) na atmosfera (medido em g/cm^2) onde o máximo número de partículas secundárias é atingida num chuueiro atmosférico. Ele depende da energia e do tipo de partícula primária, e pode ser usado para estimar a composição de RCs. O número de fótons Cherenkov $N_\gamma(X)$ gerados num chuueiro atmosférico está dado pela convolução do perfil de partículas carregadas $\frac{dN_e}{dX}$, principalmente elétrons, e da distribuição angular dos fótons f_i produzidos por esses elétrons. (2) Num telescópio, cada pixel i varre uma região específica da atmosfera representada por ΔX_i . Portanto, o número de fótons $N_\gamma^i(X)$ gerados por radiação Cherenkov no intervalo ΔX_i centrado em X que são detectados no pixel i , está dado por:

$$N_\gamma^i(X) = \frac{dN_e^i}{dX} \times f_i(\theta, X, X_{max}, E) \times \Delta \epsilon_{pix}^i \times \Delta X_i, \quad (1)$$

onde θ é o ângulo da direção dos fótons respeito ao eixo do chuueiro, E é a energia do chuueiro e $\Delta \epsilon_{pix}^i$ é o tamanho angular do pixel i . A profundidade X é calculada a partir de uma altitude h usando um modelo atmosférico. Portanto, a profundidade associada a cada pixel é dada pela distância h onde o eixo do pixel intercepta o plano do chuueiro. A partir desta equação é possível reconstruir o perfil de partículas no chuueiro, $\frac{dN_e}{dX}(X)$, em função da profundidade X . Depois, o perfil de partículas pode ser ajustado usando a função de Gaisser-Hillas dada por:

$$\frac{dN_e}{dX}(X) = N_{max} \left(\frac{X - X_0}{X_{max} - X_0} \right)^{\frac{X_{max} - X_0}{\lambda}} e^{-\frac{X_{max} - X}{\lambda}} \quad (2)$$

onde X_0 e λ são parâmetros de forma que não têm significado físico direto, e N_{max} e X_{max} têm significado físico, sendo N_{max} o máximo número de partículas na profundidade X_{max} . Dado que a função f_i depende do X_{max} , é possível usar um ajuste iterativo até o X_{max} convergir considerando um valor inicial "arbitrário". (3)

Referências:

1 NAUROIS, M.; MAZIN, D. Ground-based detectors in very-high-energy gamma-ray astronomy. *Comptes Rendus Physique*, v. 16, 2015. DOI: 10.1016/j.crhy.2015.08.011. 2 ARBELETICHE, L.; DE SOUZA, V. **Parametrization of the angular distribution of Cherenkov light in air**

showers . 2020. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2007.13812.pdf>. Acesso em: 10 ago. 2020. 3
UNGER, M.; DAWSON, B.R.; ENGEL, R.; SCHÜSSLER, F.; ULRICH, R. Reconstruction of longitudinal profiles of ultra-high energy cosmic ray showers from fluorescence and Cherenkov light measurements. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A** , v. 588, n. 3, 2008. DOI: 10.1016/j.nima.2008.01.100

PG60

Self-duality in the context of the Skyrme model

FERREIRA, L. A. ; LIVRAMENTO, L. R.

laf@ifsc.usp.br

The Skyrme model (1) is an effective nonlinear theory of pions in 3+1 dimensions in the regime of low energy, where the action is defined in terms of space-time derivatives of the SU(2) Skyrme field. We study the modification of the Skyrme model proposed in (2), which possesses a self dual sector due to the addition of six scalar fields assembled in a symmetric and invertible three dimensional matrix h . Due to the coupling of the matrix h with the quadratic term in the space-time derivatives of the SU(2) Skyrme field and the inverse of h coupling to the quartic term, the static version of the model, as well as its self-duality equations, are conformally invariant on the three dimensional space. We show in (3) that the static and self-dual sectors of such a theory are equivalent, and also that h -fields adjust themselves to satisfy the self-duality equations for any configuration of the Skyrme SU(2) fields, and so the theory has plenty of non-trivial topological solutions. We present explicit exact solutions for arbitrary topological charges using a holomorphic rational ansatz, as well as a toroidal ansatz based on the conformal symmetry.

Referências:

1 SKYRME, T. H. R. A nonlinear field theory. **Proceedings of the Royal Society A** , v. 260, n. 1300, p. 127-138, 1961. 2 FERREIRA, L. A. Exact self-duality in a modified Skyrme model. **Journal of High Energy Physics** , v. 2017, n. 7, p. 039-1-039-12, 2017. 3 FERREIRA, L. A.; LIVRAMENTO, L. R. Self-duality in the context of the Skyrme model. **Journal of High Energy Physics** , v. 2020, n. 9, p. 031-1-031-24, 2020.

PG61

Líquidos de spin via construção de partons

SOBRAL, J. A. ; ANDRADE, E.

joaoaugustosds@gmail.com

Líquidos de spin são um estado da matéria sem ordenamento a longo alcance em temperatura zero devido a flutuações quânticas, e com características exóticas, como excitações fracionalizadas de spin. Desde 2012 (1), com resultados experimentais promissores sobre esse estado no sistema de Kagomé com spin-1/2 no material $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$, um interesse tanto teórico quanto experimental tem crescido na área pelas possíveis implicações relacionadas a computação quântica e supercondutividade de altas temperaturas. O presente trabalho de mestrado tem como diretriz conhecer a física de baixas energias de sistemas que possam apresentar esse estado excêntrico da matéria por meio de uma representação fermiônica de partons via funções de onda projetadas de Gutzwiller com um Monte Carlo Variacional (VMC) para teste de candidatos ao estado de menor energia (ground state). Utilizando teorias de campo médio e a chamada decomposição de partons, que representa os operadores de spin em termos de férmions ou bósons sujeitos a vínculos locais, estudamos o modelo Antiferromagnético de Heisenberg em uma dimensão - um dos líquidos de spin mais simples -, por meio das funções de onda projetadas de Gutzwiller (GPW) como palpite inicial para o ground state. Além disso, estudamos o modelo de Haldane-Shastry pelo fato das GPW serem auto-estados exatos desse modelo. A importância de se usar as GPW reside no fato de que o espaço de Hilbert do campo médio e da Hamiltoniana inicial do sistema só são compatíveis após a projeção dos estados iniciais sobre os estados com ocupação simples (vínculo local). Esse é um procedimento que permite a implementação numérica do VMC para estimar a energia do ground state, e a correlação entre spins para casos mais simples, buscando informações sobre o ordenamento magnético da teoria. Ambos os resultados numéricos encontrados para os modelos se encontram condizentes com o esperado numericamente na literatura, confirmando o funcionamento geral do algoritmo em uma dimensão. O esperado analiticamente para a componente z da correlação entre spins para as GPW também pode ser confirmado, demonstrando um decaimento algébrico do ordenamento magnético. O próximo passo intermediário, que já está sendo implementado, consiste em estender os estudos para um modelo de Heisenberg 2D na rede quadrada e na rede de Kagomé, onde estados de fluxo nas plaquetas elementares possibilitam diferentes palpites iniciais para o ground state devido à invariância de calibre da teoria. (2) Após essa etapa, estudaremos líquidos de spin em um modelo de Heisenberg estendido (J_1 - J_2 - J_d) em uma configuração de Kagomé com um termo de interação quiral. (3)

Referências:

1 HAN, T.-H. *et al* . Fractionalized excitations in the spin-liquid state of a Kagome-lattice antiferromagnet. **Nature** , v. 492, n. 7429, p. 406-410, 2012. 2 RAN, Y. *et al* . Projected-wave-function study of the spin-1/2 Heisenberg model on the Kagomé lattice. **Physical Review Letters** , v. 98, n. 11, p. 117205-1-117205-4, 2007. 3 PEREIRA, R.; BIERI, S. Gapless chiral spin liquid from coupled chains on the Kagomé lattice. **SciPost Physics** , v. 4, n. 1, p. 004-1-004-28, 2018.

PG62

Aplicação de imagens de ressonância magnética em meios porosos

CARDOSO, C. ; PAIVA, F. F.

camilacardoso@usp.br

Ressonância Magnética (RM) é uma técnica reconhecida por suas aplicações em ciências dos materiais e em diagnósticos médicos e tem sido de grande ajuda para os estudos de meios porosos e suas aplicações na indústria do petróleo. Porém, a aquisição de imagens de meios porosos ainda é um desafio por causa dos seus curtos tempos de relaxação e diferenças de susceptibilidade magnética entre a parede das rochas e os poros, o que pode comprometer a qualidade da imagem. (1-2) A eficiência da extração de petróleo e o aproveitamento do reservatório em poços profundos podem ser aprimorados consideravelmente utilizando técnicas de acidificação e fraturamento ácido. Essas técnicas dependem de conhecimento das características da estrutura rochosa. Algumas dessas características podem ser obtidas in situ; outras são medidas de forma mais precisa em laboratório analisando amostras extraídas. No presente projeto, a morfologia e padrões de fluxo de amostras de rochas carbonáticas acidificadas de distintas maneiras (vazão de ácido variável) estão sendo caracterizadas de forma sistemática por meio de imagens por Ressonância Magnética. Para isso, utilizamos um sistema pré-clínico de 2 Tesla BIOSPEC AVANCE III (Bruker Biospin, Ettlingen, Alemanha) para obter imagens com técnicas convencionais de eco gradiente. Os protocolos de aquisição foram otimizados para amostras de rochas sintéticas e aplicados nas amostras de carbonatos saturadas com água. Na sequência, pretendemos distinguir água e óleo para que possamos estudar fluxo multifásico. Para isso, estamos desenvolvendo e implementando algoritmos que consigam distinguir fluidos como água e óleo a partir das variações detectadas no sinal de RM. Com isso, poderemos calcular as proporções de cada um dentro dessas amostras. Inicialmente, nossas simulações estão sendo feitas considerando um sistema com dois fluidos e um modelo multiexponencial para o sinal de RM. (3) Uma vez validado, esse modelo será aplicado para quantificação em amostras rochosas saturadas com água e óleo. As imagens obtidas até o presente momento permitem obter o mapeamento espacial da distribuição do fluido dentro da rocha, bem como verificar a estrutura dos wormholes formados pelo processo de acidificação. Além disso, elas possibilitam estudar o fluxo do líquido por dentro desses wormholes. Do ponto de vista das simulações, a implementação da função que gera o sinal está feita e para que os dados sejam próximos do real, serão necessárias medidas de espectroscopia de alta resolução por RM para obter os parâmetros relativos às ressonâncias do óleo que será utilizado nos experimentos com as rochas. Com isso, seremos capazes de estudar como a rocha se comporta em diferentes situações, como, por exemplo, uma rocha molhada à água tendo óleo sendo pressurizado em um de seus extremos. Esses experimentos nos permitirão estudar em situação controlada as características de fluxo de fluidos multifásicos no interior de meios porosos acidificados. Com isso, poderemos, por exemplo, tentar compreender que tipo de acidificação se mostra mais favorável à extração do óleo de rochas carbonáticas.

Referências:

1 GALLEGOS, D.P. *et al.* A NMR technique for the analysis of pore structure: application to materials with well-defined pore structure. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 119, n. 1, p. 127-140, 1987. 2 HAACKKE, E. M. *et al.* **Magnetic resonance imaging**: physical principles and sequence design. New York: Wiley, 1999. 3 DACCORD, G. Chemical dissolution of a porous medium by

a reactive fluid. **Physical Review Letters** , v. 58, n. 5, p. 479-482, 1987.

PG63

Caracterização de elementos genéticos móveis envolvidos na transferência do gene *blaKPC* em bactérias gram-negativas de origem clínica.

BORALLI, C. M. D. S. ; SILVA, G. V. D. ; ESQUÉN, P. I. H. ; RIOS, A. L. V. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.

camila.boralli@gmail.com

A resistência aos antibióticos está alcançando níveis perigosamente altos em todas as partes do mundo. Infecções estão cada vez mais difíceis de serem tratadas, à medida que os antibióticos se tornam menos eficazes. Os β -lactâmicos são, atualmente, a classe de agentes antibacterianos mais utilizada e agem interrompendo a formação da parede celular bacteriana. Dentre os β -lactâmicos, as carbapenemases são enzimas com o maior espectro/potencial de degradação e recebem esse nome por conferirem resistência aos antibióticos carbapenêmicos, apesar de terem potencial para hidrolisar praticamente todos os β -lactâmicos. O gene *blaKPC* (beta-lactamase *Klebsiella pneumoniae* carbapenemase) codifica uma serina-carbapenemase que vem sendo descrita em várias Enterobacteriaceae.(1)(1Genes *blaKPC* foram descritos primeiramente no transposon Tn4401, ambiente genético ao qual se atribui a mobilidade do gene. Porém, há poucos relatos deste gene em outros ambientes genéticos que vêm sendo denominados *non-Tn4401 element containing blaKPC* (NTEKPC).(2-3) Além disso, essa variedade de ambientes genéticos pode ser encontrada em diferentes plasmídeos, conjugativos ou não. Não se sabe ainda o impacto desta mudança de ambiente genético e de plasmídeo na disseminação deste gene de resistência. Assim, nosso objetivo é analisar bactérias gram negativas que contenham gene *blaKPC* isoladas de infecções de pacientes hospitalizados para verificar o ambiente genético e a abrangência de NTEKPC bem como a diversidade de plasmídeos que os abrigam. As bactérias pertencem a diversas espécies e são provenientes de 4 hospitais do Brasil. Até o momento, 68 das 215 (32%) amostras bacterianas resistentes aos carbapenêmicos estudadas apresentaram o gene *blaKPC*. Em seguida, investigamos o ambiente genético que carrega o gene *blaKPC* por reações de PCR com primers específicos para Tn4401 e para um NTEKPC de um isolado clínico de Manaus identificado anteriormente pelo nosso grupo. A presença do Tn4401 foi identificada em 10 das 68 das amostras *blaKPC* positivas (15%), porém o NTEKPC descrito em Manaus não foi encontrado em nenhuma amostra. Vale ressaltar que em cada hospital observamos frequências diferentes para presença do gene no Tn4401. Em seguida, submetemos as amostras *blaKPC* positivas e Tn4401 negativas a Eletroforese em Gel por Campo Pulsado (PFGE) para identificação de populações clonais e em breve realizaremos as análises de similaridade entre as amostras. O próximo passo será sequenciar o genoma de representantes de cada população clonal para conhecer os ambientes genéticos e plasmídeos que abrigam o gene *blaKPC*. A partir destes representantes, selecionaremos uma variedade de bactérias para caracterizar seus plasmídeos quanto ao tamanhos, estabilidade, taxas de conjugação, replicação e transcrição, bem como o impacto da presença do plasmídeo no metabolismo de bactérias de diferentes espécies.

Referências:

1 ANDRADE, L. N.; DARINI, A. L. C. Bacilos gram-negativos produtores de beta-lactamases: que blablabla é esse? **Journal of Infection Control** , v,6, n.1,p.16-25,2017. 2 NAAS T.; CUZON, G.; VILLEGAS, M. V.; LARTIGUE, M. F.; QUINN, J.P.;C.; NORDMANN, P. Genetic structures at origin of acquisition of the -Lactamase *blaKPC* gene. **Antimicrobial Agents Chemotherapy** ,v.52 , n.4,

p.1257-6,2008. 3 CHEN, L.; BARUNMATHEMA, B.; CHAVDA, K. D.; DELEO, F. R.; BONOMO, R. A.; KTREISWIRTH, B. N. Carbapenemase-producing *Klebsiella pneumoniae*: molecular and genetic decoding. **Trends in Microbiology** , v.22, n.12, p.686-696, 2014.

PG64

Inhibition of vitamin B6 biosynthesis enzymes from *Staphylococcus aureus*

BARRA, A. L. C. ; NASCIMENTO, A. S.

angelica.barra@usp.br

Infectious diseases are one of the leading causes of death in the world, and the number of antimicrobial-resistant infections is increasing. *Staphylococcus aureus*, a gram-positive bacterium, is among the main multidrug-resistant pathogens (ESKAPE). In Brazil, more than 50% of *S. aureus* clinical isolates were methicillin-resistant.(1) These data evidence the urgency to identify novel therapeutic targets for antimicrobial development. The advancement of complete genome sequencing allows the identification of enzymes and pathways that are preserved in many pathogens but absent in humans and, thus, are desirable targets for antimicrobial drug discovery.(2) An example of this is the vitamin B6 (pyridoxal phosphate) *de novo* synthesis pathway. Pyridoxal 5-phosphate (PLP) is an essential cofactor for various enzymes in all organisms. PLP-dependent enzymes are involved in the biosynthesis of amino compounds such as amino acids. A multi-complex, composed of twelve monomers of Pdx1 and twelve monomers of Pdx2 enzymes, is responsible for the synthesis of PLP. Pdx2 has a glutaminase activity and delivers an ammonia molecule to Pdx1, which synthesizes PLP using ammonia, ribose 5-phosphate, and glyceraldehyde 3-phosphate.(3) There are no structural studies of the enzyme complex Pdx1/Pdx2 from *S. aureus*. For this reason, the purpose of this work is to determine the 3D structure of the isolated enzymes, as well as the complex. After that, perform inhibitor high throughput screening assays (HTS) to discover new prodrugs candidates. At the present, site-directed mutagenesis of SaPdx2, to generate a stable complex, was achieved and the biophysical analyzes of the complex are ongoing. In addition, the enzymes were well expressed in *E. coli* Rosetta (DE3) and purified by Ni-affinity chromatography followed by TEV (Tobacco Etch Virus protease) cleavage and gel filtration. SaPdx1 was crystallized with commercial crystal screening kits using the hanging-drop vapor diffusion. A complete diffraction dataset was collected at the MX2 beamline of the Brazilian Synchrotron (LNLS). The structure of SaPdx1 was solved by molecular replacement with PDB 2NV1 as a model template. The model building was performed using Phenix AutoBuild and Rosetta. The model was refined up to 2.85 Å using rosetta.refine and gave Rwork/Rfree values of 0,22/0,26. The asymmetric unit contains six Pdx1 monomers, and the dodecameric structure of the protein could easily be generated by applying crystallographic symmetry. In the active site of SaPdx1, a glycerol molecule was observed bond at the same position of the substrate ribose 5-phosphate, mimicking some substrate interactions. The SaPdx1 oligomeric state in solution was verified by DLS and SEC, both showing a hexameric form, as seen in the crystallographic packing. Preliminary enzymatic assays were carried out with Pdx1 and ammonium sulfate as an ammonia resource, and the specific activity calculated (500 μ U/mg) was similar to Pdx1 from *B. subtilis* (480 μ U/mg). At the time of this writing, the kinetic parameters were being measured. In order to identify potential inhibitors, molecular docking was performed into the active site of SaPdx1. Therefore, the next step will be the validation of these results by measuring the activity of SaPdx1 in the presence of these molecules.

Referências:

1 LEE, A. S. *et al* . Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. **Nature Reviews Disease Primers** , v. 4, n.1,p.18033,2018. 2 DREBES, J. *et al* . MRSA Infections: from classical treatment to suicide drugs **Current Medicinal Chemistry** , v. 21,n.15,p.1809-1819. 2014. 3 MÜLLER, I. B. *et al* .

The assembly of the plasmodial PLP synthase complex follows a defined course. **PLoS One** , v. 3,n.3,p.e1815,2008.

PG65

Observação do complexo hexamérico de septinas humanas por Crio-ME

MENDONÇA, D. C. ; GARRATT, R. C. ; PORTUGAL, R. V.

deborah.mendonca@usp.br

Septinas são GTPases do citoesqueleto envolvidas em uma série de importantes processos intracelulares incluindo divisão celular, tráfego de vesículas, exocitose, entre outros, atuando na formação de barreiras que impedem a difusão livre de componentes da membrana plasmática. Em humanos, alterações nos níveis de expressão das septinas ou mutações em seus genes estão relacionadas com diversos tipos de câncer, infertilidade masculina, doenças neurológicas, entre outros. Septinas possuem a capacidade de polimerizar na forma de heterocomplexos resultando em filamentos que subsequentemente se organizam em estruturas de mais alta ordem.(1) Porém, existem muitos aspectos mecânicos dessas proteínas que não são totalmente compreendidos, incluindo a forma como os heterocomplexos se agrupam corretamente. Em humanos, há a presença de 13 genes que codificam septinas (SEPT1-SEPT12 e SEPT14), que podem ser divididas em 4 grupos (Grupo da SEPT2, Grupo da SEPT6, Grupo da SEPT7, Grupo da SEPT3) com base na similaridade de sequências. As septinas de cada um desses grupos possuem uma localização específica no complexo, formando, em geral, hexâmeros ou octâmeros. Durante o desenvolvimento desse projeto, foi descoberto que os complexos hexaméricos são formados com a seguinte ordem: SEPT2-SEPT6-SEPT7-SEPT7-SEPT6-SEPT2, contrariando um resultado consagrado na literatura que sugeria uma ordem inversa, com SEPT7 na extremidade do complexo.(2-3) A continuação deste trabalho tem o objetivo de investigar os complexos humanos em termos estruturais utilizando a Criomicroscopia Eletrônica de Transmissão (Crio-ME) aliada à Análise de Partículas Isoladas, contribuindo com um melhor entendimento do mecanismo de automontagem dessas proteínas. Para isso, além de uma boa coleta de dados, é necessário preparar uma amostra homogênea com alta qualidade para que o processamento das imagens resulte em um mapa com informações estruturais a nível atômico. O primeiro complexo analisado foi o hexâmero SEPT2/SEPT6/SEPT7. Com o objetivo de evitar a polimerização do complexo em filamentos e obter uma amostra homogênea, foi utilizada uma construção da SEPT2 que mantém apenas seu domínio G (que possui atividade GTPásica), excluindo os domínios N e C terminais que garantem sua polimerização. Com as micrografias coletadas e processadas, foi possível obter um mapa de resolução global 3.8 Å. Na literatura há apenas uma estrutura de um complexo, obtida por cristalografia de raios-X e resolvida com um trímero na unidade assimétrica com a resolução de 4.0 Å, e composto pelas mesmas septinas estudadas nesse trabalho. O mapa obtido por Crio-ME nesse projeto é o primeiro que proporciona a informação completa de um complexo, além de confirmar, de forma mais direta, a ordem correta com que as septinas interagem para formação desse hexâmero.

Referências:

1 MOSTOWY, S.; COSSART, P. Septins: the fourth component of the cytoskeleton. **Nature Reviews Molecular Cell Biology** ,v. 13,n.3,p. 183–94,2012. 2 MENDONÇA, D. C. *et al* . A revised order of subunits in mammalian septin complexes. **Cytoskeleton** , v.76, n.9-10,p.457-466,2019. DOI 10.1002/cm.21569. 3 MCMURRAY, M. A.; THORNER, J. Turning it inside out: the organization of human septin hetero-oligomers. **Cytoskeleton** ,v.76,n.9-10,p.449-456,2019. DOI 10.1002/cm.21571.

PG66

A monooxigenase lítica de polissacarídeo de *Myceliophthora thermophila* (MtLPMO9A) como modelo para LPMOs de alta eficiência em processos biotecnológicos.

SEPULCHRO, A. G. V. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; POLIKARPOV, I.

ana.sepulchro@usp.br

A crescente demanda por energia e a necessidade de substituir tecnologias químicas e combustíveis não renováveis de forma sustentável e eficiente colocam a bioconversão da biomassa lignocelulósica no centro da discussão energética atual. (1) No entanto, a alta recalcitrância desse material torna sua degradação uma tarefa não trivial, mesmo após submetida a pré-tratamentos físico-químicos. A solução biotecnológica aplicada para contornar este problema é a utilização de enzimas capazes de atuar sinergicamente na degradação eficiente deste biopolímeros.(2) Nesse contexto, emergiram as monooxigenases líticas de polissacarídeos (LPMOs - do inglês: *lytic polysaccharide monooxygenases*), enzimas dependentes de oxigênio e cobre que demonstram capacidade de melhorar o desempenho de enzimas hidrolíticas tradicionais.(3) Por se tratar de uma classe de enzima com muitas peculiaridades em relação às outras tradicionalmente empregadas na bioconversão de biomassa, os conhecimentos adquiridos na última década se mostram desconexos, abordando vários aspectos da enzima de forma isolada. O presente projeto visa o estudo da LPMO de *Myceliophthora thermophila* (MtLPMO9A), conectando os principais pontos de estudo aplicados em LPMOs em uma única enzima. Foi realizada caracterização bioquímica determinando que MtLPMO9A tem melhor desempenho em um substrato celulósico amorfo e que o ácido ascórbico, é o que leva a enzima a ter um melhor rendimento entre os agentes redutores testados. Além disso, avaliou-se que a enzima pode atuar de forma eficiente como parte de um fotobiossistema na presença de clorofilina. Este fotobiossistema foi, em seu substrato ideal, muito mais eficiente nos primeiros tempos de reação, aumentando a atividade enzimática em relação ao sistema padrão. Ainda, avaliou-se a preferência da MtLPMO9A pela fonte de oxigênio tanto no sistema tradicional quanto no sistema fotoativado mostrando que a enzima pode utilizar tanto H_2O_2 quanto O_2 em seu mecanismo de ação. Outra análise revelou que a enzima tem um efeito sinérgico na degradação de polpa celulósica quando combinada com celulasas tradicionais celobiohidrolase (ThCel7A) e endoglucanase (ThCel7B); levando um aumento de 83,17% e 84,00% nos produtos gerados na associação com ThCel7A e ThCel7B respectivamente. Os resultados obtidos levam a uma compreensão do mecanismo de ação da MtLPMO9A, bem como apontam para seu grande potencial em agregar misturas enzimáticas aumentando a eficiência da bioconversão da biomassa. Além disso, ao conectar os diversos aspectos estudados em LPMOs, tais resultados auxiliam na construção de um conhecimento sólido e conexo desta classe de enzimas.

Referências:

1 RAGAUŠKAS, A. J. *et al* . The path forward for biofuels and biomaterials. **Science** , v. 311, n. 5760, p. 484–489, 2006. 2 STEEN, E. J. *et al* . Microbial production of fatty-acid-derived fuels and chemicals from plant biomass. **Nature** , v. 463, n. 7280, p. 559–562, 2010. 3 VAAJE-KOLSTAD, G. *et al* . An oxidative enzyme boosting the enzymatic conversion of recalcitrant polysaccharides. **Science** , v. 330, n. 6001, p. 219–222, 2010.

PG67

Implementação de um estado gato de Schrödinger de spin nuclear em um sistema quadrupolar via Ressonância Magnética Nuclear

LEAL, A. C. D. S. ; BONAGAMBA, T. J.

adrianeleal@ifsc.usp.br

O estado gato de Schrödinger é um conceito que está fortemente vinculado à superposição de estados quânticos macroscopicamente distintos, e estes desempenham um papel importante no entendimento dos fundamentos da Mecânica Quântica. Dessa forma, uma grande atenção tem sido dada ao problema da geração e propriedades desses estados. (1) Dentro deste contexto, este trabalho teve como ponto de partida o estudo feito por Agarwal, Puri e Singh (2), onde estados gato de Schrödinger foram gerados a partir da dinâmica de um sistema de N átomos de dois níveis (sistema físico) interagindo com um campo quântico (reservatório) numa cavidade. Os estados macroscópicos para este caso foram estados coerentes atômicos e os autores mostraram que uma interação não-linear, a qual aparecia no Hamiltoniano efetivo do sistema, era responsável por gerar uma superposição de estados coerentes atômicos. Nesse sentido, neste trabalho estudou-se também Hamiltonianos efetivos de outros sistemas físicos e mostrou-se que estes são equivalentes ao Hamiltoniano proposto por Agarwal, Puri e Singh. (2) Portanto, a contribuição não-linear do Hamiltoniano efetivo destacada pelos modelos teóricos possui a mesma natureza que a de um sistema quadrupolar de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Deste modo, pôde-se implementar um estado gato de Schrödinger de spin nuclear, com o auxílio do método de tomografia de Carvalho Neto (3), para $I = 3/2$, em um núcleo de Sódio, em um cristal líquido liotrópico de dodecil sulfato de Sódio. As superposições de estados coerentes de spin nuclear foram geradas na condição de ressonância, para o instante de tempo $t = 1/2f_Q$, onde f_Q representa o valor do acoplamento quadrupolar devido à interação do momento de quadrupolo do núcleo com gradientes de campo elétrico, próximos ao núcleo. Além disso, experimentalmente, f_Q foi quantificado a partir da separação entre as linhas do espectro de equilíbrio, possuindo um valor de 15222 Hz, permitindo obter uma fidelidade de 0,88. Além disso, calculou-se a função de distribuição de quasiprobabilidade de Wigner, a partir de dados experimentais, demonstrando que havia correlação quântica entre os estados quânticos, conforme previsto teoricamente.

Referências:

1 SCHRÖDINGER, E. Der stetige übergang von der mikro-zur makromechanik. **Naturwissenschaften**, v. 14, n. 28, p. 664-666, 1926. 2 AGARWAL, G. S.; PURI, R. R.; SINGH, R. P. Atomic Schrödinger cat states. **Physical Review A**, v. 56, n. 3, p. 2249-2254, 1997. 3 CARVALHO NETO, J. T. **Tomografia de estado quântico via ressonância magnética nuclear através de rotações globais do sistema de spins**. 2007. 170 f. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

PG68

A Bayesian framework of reaction networks for biochemical models

ARAUJO, G. ; MAIA, L. P.

guilherme.david.araujo@gmail.com

We propose a general modeling framework that is suited for biochemical systems ranging across many scales, covering domains such as genetic regulation, epidemiology, ecological interactions, and evolutionary dynamics. The framework is built from a Bayesian perspective and based upon the theory of reaction networks. Reaction networks provide a relational model of local interactions giving rise to system-level populational features. These interactions are modeled as reactions with a mechanistic interpretation. From the network model, we can derive a stochastic description given by Markov jump processes and a correspondent deterministic description given by systems of differential equations. (1) Beyond the direct dynamical analysis, the framework provides an intuitive process of parameter estimation from possibly incomplete and sparse observations, using a linear noise approximation as data likelihood for stochastic models. We also expand the scope of reaction networks in order to include an additional class of systems; this expansion enables us to devise a mechanistic justification for evolutionary dynamics (2), deriving, from reaction networks, dynamics as the Price equation, the replicator-mutator equation, generalized Lotka-Volterra models, and evolutionary game theory models, along with providing stochastic counterparts. We present here two applications of our framework. First, the parameter estimation process applied to a genetic regulation oscillatory model and a simple epidemiology compartment model using Markov chain Monte Carlo integration of data. Then, we apply the extended reaction network to the problem of parental care evolution in population ecology, modeling the evolution of a care-related trait with a time-in/time-out mating system. (3)

Referências:

1 SCHNOERR, D.; SANGUINETTI, G.; GRIMA, R. Approximation and inference methods for stochastic biochemical kinetics: a tutorial review. **Journal of Physics A** , v. 50, n. 9, p. 093001-1-093001-60, 2017. 2 PAGE, K. M.; NOWAK, M. A. Unifying evolutionary dynamics. **Journal of Theoretical Biology** , v. 219, n. 1, p. 93-98, 2002. 3 KOKKO, H.; JENNIONS, M. D. Parental investment, sexual selection, and sex ratios. **Journal of Evolutionary Biology** , v. 21, n. 4, p. 919-948, 2008.

PG69

Caracterização biofísica de ORC1/CDC6 e Pol de *Trypanosoma cruzi*

LEÃO, M. ; THIEMANN, O. H.

murilo.leao.pereira@gmail.com

O genoma de qualquer organismo, com exceção de vírus, é constituído por ácido desoxirribonucleico (DNA), o qual, deve ser replicado durante o ciclo celular. A replicação começa pelo reconhecimento de regiões específicas. A fim de reconhecê-las, é formado o complexo de pré-replicação (CPR). Este consiste, em eucariontes, em proteínas do Complexo de Reconhecimento de Origem (ORC1-6), Proteína de Controle de Divisão Celular 6 (CDC6), CDT1 e MCM2-7. A maquinaria básica dita que as ORCs reconhecem as origens de replicação. Uma vez ligadas ao DNA, ocorre a interação do complexo das ORCs à CDC6 e, em seguida, CDT1 é recrutada. Por fim, esse complexo de três proteínas consegue receber a helicase MCM e daí iniciar a replicação.(1) Além dos membros do CPR, há outros elementos vitais para o processo ser bem sucedido. Um deles é a DNA Polimerase (Pol). Esta é responsável por regular a integridade do genoma por atuar em situações de quebra da fita dupla do DNA e, especificamente em mamíferos, regula o tempo de disparo da origem e o recrutamento da MCM. Há pouco conhecimento sobre a via de replicação em Tripanosomatídeos. Sabe-se, no entanto, que há uma proteína TcORC1/CDC6 (ORC1/CDC6 de *Trypanosoma cruzi*), homóloga tanto a ORC1 quanto a CDC6 de outros organismos e cuja participação no CPR já foi comprovada. Um único gene homóloga essas duas proteínas é algo que foi observado em Arqueobactérias anteriormente. (2) Ao mesmo tempo, experimentos de co-immunoprecipitação indicam interação entre TcORC1 e TcPol-helicase (Pol-helicase de *Trypanosoma cruzi*), que apresenta identidade de sequência ao domínio helicase da Pol de outros organismos.(3) Como a via de replicação de DNA é vital para a sobrevivência do parasito, o estudo de TcORC1/CDC6 e TcPol-helicase é de suma importância por auxiliar no entendimento de como a replicação acontece no organismo e na elucidação de questões até então obscuras sobre sequências de DNA do genoma de *Trypanosoma cruzi* que poderiam ser origens de replicação. Ademais, a caracterização desse maquinário pode beneficiar na futura descoberta de fármacos que, ao inibi-lo, inviabilizam a sobrevivência do parasita. Dessa forma, o início do projeto se concentrou na otimização de protocolos de expressão e purificação de duas construções, TcORC1/CDC6 e TcPol, em *Escherichia coli* Rosetta DE3 em vetor pET28a. Em posse das proteínas, o foco agora está direcionado a caracterizar biofisicamente cada uma delas e em complexo de modo a se obter dados sobre a estequiometria da interação e o kd por métodos como anisotropia de fluorescência e SEC-MALS. Ademais, serão feitos ensaios de atividade com ambas as proteínas para determinação de um perfil funcional.

Referências:

1 SILVA, M.S. *et al* . Nuclear DNA replication in trypanosomatids: there are no easy methods for solving difficult problems. **Trends Parasitology** ,v.33, n.11, p.858–874,2017. 2 GODOY, P.D.M; *et al* . Trypanosome prereplication machinery contains a single functional Orc1/Cdc6 protein, which is typical of archaea. **Eukaryotic Cell** , v.10,p.1592–15603,2009.DOI: 10.1128/EC.00161-09. 3 LIMA, L. P. *et al* . Ortholog of the polymerase theta helicase domain modulates DNA replication in *Trypanosoma cruzi*, **Scientific Reports** , v.9, n.2888, p.1-16,2019.

PG70

Gold nanoparticles onto glass substrates for plasmonic biosensing applications

OITICICA, P. R. A. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

praoitica@ifsc.usp.br

The need for rapid disease diagnosis with Point-of-Care (PoC) biosensor devices became even more important after the SARS-CoV-2 pandemic. The detection time and the availability of tests can make a difference in the pandemic control and improve disease diagnosis and treatment. A biosensor consists of a biological receptor, a transducer, and a signal processing method. Gold nanoparticles on solid substrates can be used in transducers by exploiting the Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR) in which the absorption spectrum changes with variations in the refractive index near the gold nanoparticles.(1) Adsorption of biomolecules to the gold nanoparticles or to a functionalized probe film formed on the nanoparticles can change the effective film refractive index producing a red shift in the LSPR band wavelength.(2) We are working in an optical plasmonic substrate that consists of gold nanoparticles embedded onto a solid glass substrate to be tested as transducers for biosensor devices. The fabrication process involves the growth of gold ultrathin films onto glass substrates following by a thermal annealing process. The nanoparticles have dimensions varying from 10 nm to 200 nm, and can be easily functionalized.(3) We hope to overcome some limitations providing a substrate platform with large scale and easy fabrication. The detection method using the LSPR spectrum can be performed with low cost and easy-to-use instruments, not requiring highly qualified technical personnel. Therefore, this device is a potential component of point-of-care devices.

Referências:

1 MEJÍA-SALAZAR, J. R.; OLIVEIRA, O. N. Plasmonic biosensing. **Chemical Reviews** , v. 118, n. 20, p. 10617–10625, 2018. 2 LIN, H. T. H. *et al* . A large-area nanoplasmonic sensor fabricated by rapid thermal annealing treatment for label-free and multi-point immunoglobulin sensing. **Nanomaterials** , v. 7, n. 5, p.100, 2017. 3 OLIVERIO, M. *et al* . Chemical functionalization of plasmonic surface biosensors: a tutorial review on Issues, strategies, and costs. **ACS Applied Materials and Interfaces** , v. 9, n. 35, p. 29394–29411, 2017.

PG71

Teoremas de flutuação para o calor em termodinâmica quântica: uma abordagem por integral de trajetória

AFONSO, R. ; SOARES-PINTO, D. O.

ricardo.afonso@ifsc.usp.br

A termodinâmica quântica pode ser considerada uma área emergente que investiga as relações entre a mecânica estatística fora do equilíbrio e os processos quânticos. Seu desenvolvimento envolve desde o papel da coerência e do emaranhamento na transferência de calor em dispositivos e máquinas térmicas quânticas até formulações fundamentais de variáveis termodinâmicas ao nível de flutuações quânticas. Nas últimas décadas com o advento da termodinâmica clássica estocástica, a primeira e a segunda lei passaram a ter uma formulação mais detalhada, em que variáveis termodinâmicas como o trabalho, o calor e a entropia são funcionais dependentes de trajetórias estocásticas e obedecem relações de flutuações em processos termodinâmicos. (1) Logo, para que seja possível estender a termodinâmica para o regime quântico é necessário derivar tais relações de flutuações para processos quânticos. Embora haja um extensivo progresso da obtenção de tais relações no formalismo usual da mecânica quântica, nosso projeto se concentra em derivar teoremas de flutuações que também definam as variáveis termodinâmicas através de funcionais. O uso do método de integrais de caminho de Feynman tem sucedido em derivar teorema de flutuações para o trabalho, o que trouxe não somente sua definição como um funcional, mas também mostrou correções quânticas à definição clássica de trabalho. (2) Portanto, devido ao recente progresso com o método de integrais de caminho, nosso projeto tem sido a investigação de teoremas de flutuações para o calor e a produção de entropia em sistemas quânticos dissipativos. Ao utilizar um paradigma para sistemas dissipativos como o modelo Caldeira-Leggett e o método de medições de dois pontos, derivou-se uma relação de flutuação para o calor com estado inicial produto entre sistema e o reservatório através da função característica. Com isso, foi possível introduzir um funcional para o calor que obedeça à reversibilidade microscópica, cuja relação é dada pela razão entre as probabilidades do processo natural e do processo reverso, se tornando o primeiro passo à derivação para o teorema de flutuação detalhado. (3) Porém, até o momento detalhes sobre a definição do calor tem sido tópico de bastante discussão na literatura em diferentes regimes de acoplamentos e preparação de estados iniciais. Nossos recentes esforços têm caminhado para dar mais clareza a essas questões termodinâmicas sob a perspectiva de fundamentos que contemplem as definições de calor e entropia no regime quântico.

Referências:

- 1 JARZYNSKI, C. Equalities and inequalities: Irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale. **Annual Review of Condensed Matter Physics** , v. 2, p. 329-351, Mar. 2011.
- 2 FUNO, K.; QUAN, H. Path integral approach to quantum thermodynamics. **Physical Review Letters** , v. 121, n. 4, p. 040602-1-040602-7, July 2018.
- 3 FUNO, K.; QUAN, H. Path integral approach to heat in quantum thermodynamics. **Physical Review E** , v. 98, n. 1, p. 012113-1-012113-10, July 2018.

PG72

Influence of crosslinking agents on the ionic and electronic conductivity of PEDOT: PSS for application in Bioelectronics: would the literature be doing the best choice?

SOUZA, R. F. S. D. ; FARIA, G.

rafael.francisco.sousa@usp.br

The electrical conductivity of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) with polystyrenesulfonate(PEDOT: PSS) depends significantly on its morphology, microstructure and number of counter ions that balance the positive doping charges carried by the conjugated PEDOT chains. However, due to the high solubility of PSS-rich domains in water or other polar solvents, PEDOT:PSS films easily undergo dissolution when exposed to such solvents. (1) In order to prevent such dissolution, crosslinking agents are normally added to the polymer solution, prior to film formation, to stabilize the solid-state film. As a consequence of crosslink addition, both the film morphology and electronic/ionic conductivity are negatively impacted, generating films with lower performances when compared to crosslink-free samples. Here we aim to analyze the behavior of PEDOT:PSS films mixed with different crosslinking agents, namely the 3-glycidyloxypropyltrimethoxysilane (GOPS), 3-chloropropyltrimethoxysilane (CLORO), 3-(Trimethoxysilyl)propyl methacrylate (TRIME) and Vinyltrimethoxysilane (VINIL). The electrical conductivity was evaluated by means of four-probe measurement, revealing that PEDOT:PSS films crosslinked with CLORO, VINIL and TRIME have similar electrical conductivity, while films crosslinked with GOPS have the lowest electrical conductivity compared with pristine PEDOT:PSS films. Other measurements, like transfer and output curves of the films, shows that GOPS, the most used crosslink agent by the literature to work with PEDOT:PSS films, is not the best choice when compared to the other three crosslink agents in this work, which gives better electrical properties to PEDOT:PSS films. Our work suggest that the usage of more optimized crosslink agents can enhance the performance of PEDOT:PSS mixed ionic-electronic conductor devices, such as a glucose biosensor, built and studied in this work.

Referências:

1 HAKANSSON, A. *et al* . Effect of (3-glycidyloxypropyl)trimethoxysilane (GOPS) on the electrical properties of PEDOT:PSS films. **Journal of Polymer Science B** , v. 55, n. 10, p. 814-820, May 2017.

PG73

Estudo da interação entre água do mar calibrada, petróleo e rochas carbonáticas através de espectroscopia vibracional não-linear (SFG)

PALMA, N. ; MIRANDA, P. B.

nicolau.filho@usp.br

Atualmente temos diversas indústrias visando a exploração de reservatórios do pré-sal para suprir as necessidades energéticas futuras e com isso novos estudos surgiram para aumentar a extração nestes reservatórios não usuais com a injeção do que é chamado de água calibrada. Existe uma grande quantidade de pesquisas sobre recuperação de petróleo através de injeção de água com baixa concentração salina (LSWI), abrangendo aproximadamente cerca de 20 anos de estudo. (1) Muitos experimentos mostraram que LSWI pode aumentar a recuperação de petróleo comparado com as técnicas convencionais, mas nem sempre é o que acontece. Para entender o interação rocha-água-óleo a nível molecular foi proposto um estudo com uso da técnica de espectroscopia vibracional por geração de soma de frequências (SFG) visando entender como a presença de sais interfere na molhabilidade das rochas, o que pode levar ao aumento da recuperação de petróleo. A espectroscopia SFG pode trazer informações sobre a natureza química por meio do espectro vibracional e sobre o ordenamento médio das moléculas em uma única monocamada.(2) Esta técnica permite uma investigação direta das moléculas em meios com quebra da simetria de inversão, que ocorre naturalmente em interfaces entre dois meios isotrópicos como gases, líquidos e um grande número de sólidos. Primeiramente realizamos um estudo detalhado da anisotropia e dependência com a polarização do espectro SFG da superfície da Calcita, que é um mineral carbonático que utilizamos como rocha modelo. Tais resultados servirão de referência direta para o entendimento de resultados futuros de interação de calcita com água, íons e óleo. Após estes experimentos foram realizados experimentos de limpeza da superfície com o uso de água com baixa concentração salina em superfícies de rochas modificadas por ácido esteárico, óleo condensado e “óleo morto”. Estratégias similares já foram relatadas com solventes orgânicos ao invés do uso de água com baixa salinidade.(3) Através de nossos experimentos descobrimos que nem a limpeza com água do mar diluída e nem com água pura foram capazes de remover por completo (até a última monocamada) o óleo adsorvido na calcita. Isso explica o modesto efeito da LSWI e os baixos valores de recuperação total de petróleo (30%) para os reservatórios do pré-sal. Atualmente estamos utilizando simulações ab initio da superfície da calcita para concluir o trabalho de caracterização da superfície da mesma, pois assim poderemos obter informações importantes de como os íons de carbonato estão organizadas na superfície e como é dada a interação com diferentes substâncias que podem entrar em contato com ela. Estas serão informações importantes para estudos posteriores buscando obter uma solução capaz de remover por completo o óleo e desse modo aumentar a recuperação de petróleo.

Referências:

1 SOHRABI,M. *et al* . Novel insights into mechanisms of oil recovery by use of low-salinity-water injection. **Society of Petroleum Engineers Journal** , v. 22, n.2,p. 407-416,2017. 2 SHEN,Y. R. Surfaces probed by nonlinear optics. **Surface Science** , v. 299-300, p. 551–562,1994. DOI 10.1016/0039-6028(94)90681-5. 3 YANG, Zeng,, *et al* . Binary solvents with ethanol for effective bitumen displacement at solvent. mineral interfaces. **Energy Fuels** , v. 29,n.7, p. 4222-4226,2015.

PG74

Aspectos informacionais da gravidade

BORIN, D. ; VANZELLA, D.

borin@ifsc.usp.br

A busca por uma teoria mais fundamental da gravidade que seja compatível com os princípios introduzidos pela teoria quântica tem frustrado gerações de físicos por quase um século. Mais recentemente, a possibilidade de a gravidade não ser de fato uma interação fundamental (1-3), mas, ao invés disso, emergir como consequência de princípios mais gerais aplicáveis aos sistemas físicos pode apontar para uma profunda inter-relação entre gravidade e conceitos de teoria de informação, como entropia clássica e entropia de emaranhamento quântico.

Referências:

- 1 JACOBSON, T. **Black hole entropy and induced gravity** . 1994. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/gr-qc/9404039>. Acesso em: 30 set. 2020.
- 2 SOLODUKHIN, S. N. Entanglement entropy of black holes. **Living Reviews in Relativity** , v. 14, n. 1, p. 8-1-8-96, 2011.
- 3 VERLINDE, E. On the origin of gravity and the laws of Newton. **Journal of High Energy Physics** , v. 2011, n. 4, p. 029-1-029-26, 2011.

PG75

Determinantes estruturais para a especificidade de interação nas interfaces G e NC de septinas humanas

CABREJOS, D. A. L. ; ANDRÉ, I. ; VALADARES, N. ; USON, I. ; PEREIRA, H. D. ; GARRATT, R. C.
dleonardo@usp.br

Septinas são proteínas envolvidas em diversos processos celulares (citocinese, transporte de moléculas, espermatogênese, apoptose etc.), razão pela qual estão relacionadas com o desenvolvimento de várias doenças. Para realizar suas funções, uma septina de cada grupo (4 grupos diferentes em humanos) se associa para formar heterofilamentos usando dois tipos de interfaces: a interface G e a interface NC. (1) Embora seja conhecido o tipo de interface de contato e a ordem específica das septinas na montagem do filamento, os mecanismos moleculares que controlam a polimerização correta do filamento ainda são desconhecidos. (2) Aqui, descrevemos os estudos realizados nas interfaces G e NC das septinas, a fim de encontrar os mecanismos moleculares de interação específica e verificar a substituição das septinas por outras do mesmo grupo. Oito combinações de heterodímeros "G" de septinas foram co-expressas e purificadas para serem caracterizadas por técnicas biofísicas, apresentando heterodímeros homogêneos em solução (SEC e SEC-MALS) com presença de GTP e GDP em proporções aproximadamente equimolares. Além disso, cada dímero exibe uma estabilidade térmica diferente, o que pode indicar uma preferência de interação para a formação de complexos. Os estudos cristalográficos dos heterodímeros G permitiu identificar interações específicas que determinam a especificidade do complexo formado por septinas do grupo II e grupo III (validando a substituição de septinas do mesmo grupo), ajudando também a explicar a presença de um grupo cataliticamente inativo em estas proteínas. Por outro lado, as estruturas cristalográficas dos coiled-coils das septinas 1, 4 e 5 (Interface NC) permitiu observar um novo motivo proteico que sugere estar relacionado com a interação entre dois heterofilamentos, formando estruturas de alta complexidade em septinas (redes etc.).

Referências:

1 KINOSHITA M. *et al* . Self- and actin-templated assembly of mammalian septins. **Developmental Cell** , v. 3, n. 6, p. 791-802, 2002. 2 SIRAJUDDIN, M. *et al* . Structural insight into filament formation by mammalian septins. **Nature** , v. 449, n. 7160, p. 311-315, 2007.

PG76

Optical trapping of micro and nanoparticles and development of dynamic optical potentials

MARTINS, T. T. ; SILVA, P. F. ; MUNIZ, S.

thalyta@usp.br

Since the development of the first methods to control the motion of particles using lasers, optical tweezers have been used to explore micro and nanoparticles dynamics in many areas of knowledge. (1) With the advance of instrumentation techniques for data detection and control of optical potentials, several experimental studies of nonequilibrium thermodynamics in small systems have become possible. In this project, we intend to improve the experimental setup built during the master's and initiate the first studies of thermodynamic systems in this regime. (2) The trapping apparatus contains a diode infrared laser and a 100 \times oil immersion objective. The data are collected with a quadrant photodetector that captures the particle position with a temporal resolution of up to 6 μ s and a spatial resolution of 2 nm. An acousto-optic modulator (AOM) controls the beam parameters, such as angular position and power, and, with this experimental configuration, we can generate trapping potentials dynamically modulated over time. At low frequencies, it is verified that the laser focus can be moved in the trapping plane efficiently by up to 4 μ m. At high frequencies, it is possible to generate average potentials over time due to the particle inertia in the fluid. Methods that use feedback from the center of mass position are being developed, opening up the possibility of creating even more complex potentials. The built system is already capable of trapping particles of the order of hundreds of nanometers to a few micrometers with different geometries. Several improvements are being developed in the system to trap even smaller particles and to guarantee better control during the generation of potentials. In addition, fluctuation theorems, such as Jarzynski's equality and Crook's relation, are being verified as well as other results of stochastic thermodynamics, such as the Landauer's principle.

Referências:

1 JONES, P. H.; MARAGÔ, O. M.; VOLPE, G. **Optical tweezers** : principles and applications. Cambridge: Cambridge University Press, 2015. 561 p. 2 MARTINS, T. T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos** . 2019. 161 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

PG77

Uso de nanoemulsão de Indocianina Verde para o tratamento de pneumonia por terapia fotodinâmica

JASINEVICIUS, G. O. ; TOVAR, J. S. D. ; KASSAB, G. ; KURACHI, C. ; TOMÉ, A. J. B. ; BAGNATO, V. S. ; INADA, N. M. ; BUZZÁ, H. H.

gabriel.jasine@ifsc.usp.br

A pneumonia adquirida na comunidade (CAP) é uma infecção do trato respiratório inferior (ITR) causada por diferentes tipos de patógenos, incluindo vírus e bactérias. Em 2017, a CAP causou a morte de mais de 50 mil brasileiros e a hospitalização de quase 600 mil pessoas. Além disso, a hospitalização é um fator que contribui para o desenvolvimento da pneumonia ocasionada por bactérias resistentes a antibióticos. A *Streptococcus Pneumoniae* é o agente patológico mais comum causador dessa doença. (2) A terapia fotodinâmica (TFD) é um tipo de tratamento que é capaz de lidar com bactérias, inclusive as resistentes a antibióticos. Aliando um fotossensibilizador (FS) aplicado no microambiente desejado, o uso da luz em um comprimento de onda específico para sua ativação e moléculas como o oxigênio que aceitam a transferência de energia ou de elétrons desse FS, ocorre a formação de espécies reativas de oxigênio (ROS) e singletos de oxigênio que atacam as células alvo. A indocianina verde (ICG) é um dos FS utilizados na TFD. Estudos *in vitro* provaram a capacidade da ICG de inativar a *S. Pneumoniae* na ordem de 5 Log(UFC/mL). Além disso, esse FS é excitado por comprimentos de onda da luz em torno de 800 nm, sendo a luz capaz de penetrar em tecidos biológico mais profundos, tornando-se possível a utilização da iluminação extracorpórea para ativar a ICG dentro dos pulmões. (1) Contudo, características como degradação e instabilidade em meios aquosos, baixo rendimento quântico, entre outros, limitam sua aplicação clínica. Para atenuar essas desvantagens, a ICG pode ser conjugada com lipídeos, formando nanopartículas compostas de lipossomas esféricas que são bioassimiláveis e com baixa toxicidade. (3) Este trabalho visa avaliar a melhoria da eficiência fotodinâmica e da biodisponibilidade da ICG ao conjugá-la na interface de lipossomas (NanoICG). Com o uso do espectro UV-Vis, foi possível caracterizar que a NanoICG possui um pico de absorção em torno de 894 nm em solventes como o PBS, pico similar a ICG em seu estado agregado. Em solventes orgânicos como o etanol, seu espectro de absorção transiciona, com a influência da temperatura e do tempo, para um similar a ICG livre, com um pico de absorção em torno de 780 nm. Em dH₂O, a NanoICG também transiciona seu espectro de absorção, porém em uma taxa menos intensa em relação ao etanol. Para compreender como a NP interage com microrganismos causadores da pneumonia serão feitos ensaios *in vitro* para observar a citotoxicidade do composto, além da sua capacidade de inativação fotodinâmica com o uso de diferentes comprimentos de onda. Com o uso da microscopia de fluorescência será possível observar a capacidade de dissociação da NanoICG com as bactérias alvo. Por fim, serão feitos testes de inativação fotodinâmica *in vivo* em camundongos para avaliar a eficiência da eliminação de patógenos utilizando a NanoICG, NanoICG aliada a antibióticos e a NanoICG conjugada com antibióticos.

Referências:

- 1 GERALDE, M. C. *et al* . Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination - an experimental model. **Physiological Reports** , v. 5, n. 5, p. 1–7. 2017. DOI: 10.14814/phy2.13190
- 2 GOMES, M. Community-acquired pneumonia: challenges of the situation in Brazil. **Jornal Brasileiro de Pneumologia** , v. 44, n. 4, p.254–256, 2018. DOI: 10.1590/s1806-37562018000040002.
- 3 WANG, H. *et al* . T h e r a n o s t i c s Indocyanine green-incorporating

nanoparticles for cancer theranostics. **Theranostics** , v. 8, n. 5, 2018. DOI: 10.7150/thno.22872

PG78

Descoberta de candidatos antivirais baseados na estrutura da enzima NS5 RNA polimerase RNA-dependente do vírus da febre amarela

GAWRILJUK, V. ; OLIVA, G. ; NOSKE, G. D. ; GODOY, A. S. D.

victor.gawriljuk.oliveira@usp.br

Nos últimos dois anos o Brasil voltou a apresentar surtos de febre amarela próximos a grandes centros urbanos. Os surtos levaram o Ministério da Saúde a um estado de alerta devido ao grande perigo de uma reurbanização da doença, que não ocorre a mais de setenta anos no país. Uma campanha em massa foi realizada a fim de vacinar a população e controlar a presença do vírus na região, uma vez que o único método profilático da doença é a vacina de vírus atenuado 17D.(1)A falta de um tratamento para a febre amarela, assim como para outras infecções semelhantes, e.g. Zika e Dengue, evidenciam o perigo dos flavivirus para a saúde pública. Dentre as metodologias disponíveis para a seleção de novos fármacos está o planejamento baseado na estrutura do receptor (SBDD). Com base na estrutura tridimensional de proteínas-alvo validadas, este método utiliza diversas técnicas computacionais, sempre integradas com métodos experimentais de síntese e avaliação dos compostos planejados, e tem sido cada vez mais usada para o desenvolvimento de novos fármacos. O vírus da febre amarela é um membro da família dos flavivirus, com genoma constituído por uma única fita positiva de RNA que codifica por 3 proteínas estruturais e outras 7 não estruturais. A proteína não-estrutural NS5 do vírus da febre amarela contém dois domínios que desempenham funções centrais para a replicação do RNA viral na célula infectada: um domínio tipo RNA-dependente-RNA-polimerase (RdRp) e um domínio metiltransferase. O bloqueio específico de qualquer destas funções é letal para a replicação do vírus.(2) Até o momento foi possível padronizar dois ensaios de atividade para a proteína. Um dos ensaios apresentou alta capacidade para testar compostos em larga escala. A triagem de uma biblioteca de 400 compostos, resultou em 25 possíveis ligantes, entretanto muitos deles apresentaram interação com a sonda. O composto mais potente na faixa de nanomolar apresenta uma estrutura nova, com grupos químicos análogos a inibidores já descritos da polimerase de dengue, sendo necessário avaliar o seu modo de inibição.

Referências:

- 1 POSSAS, C. *et al* . Yellow fever outbreak in Brazil: the puzzle of rapid viral spread and challenges for immunisation. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz** , v. 113, n. 10, p. 1–12, 2018. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?cript=sci_arttextpid=S0074-02762018001000200Ing=entIng=en. 2
- 2 KLEMA, V. J. ; RAHDAKISHMAN,P. ; CHOI, K. H. Flaviviral replication complex: coordination between RNA synthesis and 5'-RNA capping. **Viruses** , v. 7, n. 8, p. 4640–4656, 2015.

PG79

Vórtices em superfícies curvas e fechadas

BERETA, S.

salvio.bereta@usp.br

Um dos mais excitantes desenvolvimentos no estudo de gases atômicos ultra-frios consiste na observação dos vórtices. A razão para isso é que os vórtices em condensados de Bose Einstein constituem um dos maiores indícios da natureza quântica dessa amostra, já que representa a maneira particular da amostra manifestar o momento angular dos átomos. (1) O estudo dos vórtices em superfícies curvas e fechadas como o estudo do comportamento dos vórtices em casca esférica 2D é possível através da transformação conforme onde a casca é projetada no plano complexo, e após resolvido no plano complexo é possível tirar a solução para o sistema original. Também é possível estudar a dinâmica dos vórtices em superfícies toroidais planas através de transformação conforme (2), também é possível a observação experimental do toróide de gases frios com vórtices. (3)

Referências:

1 PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein condensation**. Oxford: Oxford University Press, 2003. 2 SCHULTE, T.; SANTOS, L.; SANPERA, A.; LEWENSTEIN, M. Vortex-vortex interactions in toroidally trapped Bose-Einstein condensates. **Physical Review A**, 2002, v. 66, n. 3, p. 033602. DOI: 10.1103/PhysRevA.66.033602. 3 GUO, Y. Supersonic rotation of a superfluid: a long-lived dynamical ring. **Physical Review Letters**, v. 124, n. 2, p. 025301, 2020

PG80

Uso de espectroscopia Raman: aplicações na análise de dentes reirradiados por radioterapia.

MATTOS, V. S. ; SANTOS, T. T. D. ; CARVALHO, F. K. D. ; CASTRO NETO, J. C.

vicente.mattos@usp.br

A espectroscopia Raman é uma técnica de análise dos espectros vibracionais das moléculas, que fornece informações sobre ligações químicas presentes. Esta espectroscopia se baseia na excitação das moléculas por luz monocromática e interação desta com estados vibracionais associados às ligações químicas presentes. (1) O objetivo deste trabalho se baseia em analisar os efeitos da reirradiação por radioterapia em dentes humanos e verificar os efeitos cumulativos sobre os mesmos através de espectroscopia Raman. As amostras utilizadas foram 44 dentes humanos separados em quatro grupos: 10 dentes não irradiados (GrupoNI); 14 dentes reirradiados até a dose 30Gy (irradiados até 60Gy e reirradiados até 30Gy – GrupoRR30); 10 dentes reirradiados até 40Gy (irradiados até 60Gy e reirradiados até 40Gy – GrupoRR40); 10 dentes reirradiados até a dose de 50Gy (irradiados até 60Gy e reirradiados até 50Gy – GrupoRR50). (2) Cada amostra foi analisada por espectroscopia Raman em espectrometro da Ocean Optics (Inc., Dunedin, FL, USA), excitação por laser de diodo ($\lambda=785$ nm), resolução espectral de 11cm^{-1} , excitação de 400mW, 5 segundos de aquisição e 3 aquisições em cada região. As regiões analisadas foram: Dentina Radicular Lingual (DR_Lin); Dentina Radicular Vestibular (DR_Vest); Esmalte Coronário Lingual (EC_Lin); Esmalte Coronário Vestibular (EC_Vest); Fundo de Sulco (FS); Junção Amelodentinária Lingual (JAD_Lin); Junção Amelodentinária Vestibular (JAD_Vest); Ponte de Cúspede (PC). Todos os espectros obtidos foram tratados utilizando rotina de processamento em MatLab criada para tal fim, fornecendo ao final os espectros individuais tratados, área total de cada espectro, assim como o valor para intensidade e área para os seguintes picos: 438nm – Pico relacionado ao Fosfato; 582nm – Modos Vibracionais 1, 3 and 4 (PO_3^{4-} na hidroxiapatita; 960nm – Alongamento vibracional simétrica dos ions fosfato (PO_4^{3-}); 1070nm – Pico do carbonato; E também foi feita a análise da razão carbonato/fosfato (1070/960). (3) Os resultados obtidos apresentam alterações cumulativas com o processo de reirradiação. É possível ver o aumento da área total com a quantidade maior de sessões de radioterapia, quando analisamos as médias por região para cada grupo. A análise das áreas dos picos apresentam a mesma tendência, com aumento de modificações, por conseguinte aumento da área do pico. Entretanto, a presença das amostras do GrupoRR30 torna a identificação de tendência incerta. A análise da razão Carbonato/Fosfato apresentou resultados interessantes na análise das intensidades dos picos para as regiões DR_Vest, EC_Lin, EC_Vest, JAD_Vest e PC. É visível para estas regiões que a razão aumenta com o acúmulo de sessões, indicando aumento da presença de carbonato em relação ao fosfato. Nota-se que as alterações geradas pelos efeitos de radioterapia são cumulativas sobre a composição dos dentes. Os espectros Raman não apresentam resultados quantitativos para mensuração de compostos presentes, entretanto, pode-se estimar o quanto as mesmas variam em relação às demais. Análises como a alteração das áreas e intensidades dos picos demonstram que modificações podem ser notadas, e que isso varia com o aumento de sessões de radioterapia. Inclusive, o aumento na relação carbonato/fosfato pode representar uma maior disposição à desmineralização do dente exposto à radioterapia quando em meio ácido.

Referências:

1 BUTLER, H. J.; ASHTON, L.; BIRD, B.; CINQUE, G.; CURTIS, K.; DORNEY, J.; MARTIN, F.

L. Using Raman spectroscopy to characterize biological materials. **Nature Protocols** , v. 11, n. 4, p. 664–687, 2016. DOI: 10.1038/nprot.2016.036. 2 REED, R.; XU, C.; LIU, Y.; GORSKI, J. P.; WANG, Y.; WALKER, M. P. Radiotherapy effect on nano-mechanical properties and chemical composition of enamel and dentine. **Archives of Oral Biology** , v. 60, n. 5, p. 690–697, 2015. DOI: 10.1016/j.archoralbio.2015.02.020 3 TIMCHENKO, E. V.; TIMCHENKO, P. E.; VOLOVA, L. T.; ROSENBAUM, A. Y.; KULABUKHOVA, A. Y. Analysis of tooth tissues using Raman spectroscopy. **Journal of Physics** : conference series, v. 769, p. 012047, 2016. DOI: 10.1088/1742-6596/769/1/012047

PG81

Caracterizando a complexidade de grafos e redes

CUNHA, É. F. D. ; COSTA, L. D. F.

evertonferc@usp.br

A ciência de redes tem apresentado um grande desenvolvimento desde a sua origem, em meados dos anos 2000, se tornando uma das áreas mais populares com inúmeras aplicações. (1) Dois importantes aspectos têm contribuído para isto. O primeiro é devido às redes complexas serem fundamentalmente grafos, tendo o potencial de representar praticamente qualquer problema ou sistema que possa ser discretizado e definido em termos das relações entre suas partes. O segundo motivo advém da fácil compreensão dos conceitos básicos por não especialistas, permitindo que as ferramentas de redes complexas possam ser entendidas e aplicadas em uma extensa variedade de áreas, de redes de distribuição de energia de um país até redes cerebrais com bilhões de neurônios. Apesar dessa facilidade de entendimento e aplicação, o conceito formal de *redes complexas* demonstra ser ainda um grande desafio, não existindo, atualmente, um consenso sobre sua definição. As interpretações mais geralmente utilizam a comparação entre características de modelos de redes complexas. Em outras palavras, classificam os modelos como simples ou complexos a partir das informações extraídas das suas medidas. Nesse sentido, a rede Erdős-Rényi (ER) é frequentemente tomada como a mais *simples* pois pode ser relativamente bem caracterizada apenas pelo número e pelo grau médio dos nós. Desta forma, a simplicidade de uma rede estaria associada à regularidade no grau de seus vértices, tendo um grafo regular como seu exemplo limite. Portanto, é possível entender o modelo ER como estatisticamente regular. No extremo oposto, considera-se redes como Barabási-Albert (BA) como *complexa* pois não é possível prever os graus de seus nós apenas pelo grau médio. Na verdade, BA é uma rede livre de escala, significando que existem alguns nós com valores muito maiores do que o grau médio, os *hubs*, e muitos nós com valores menores do que a média. Em concordância com isto, demonstrou-se que apenas a heterogeneidade de graus não é suficiente para essa classificação, pois existem redes regulares com topologias bastante complexas. (2) Devido a necessidade de refinar essa abordagem, estamos desenvolvendo uma forma de calcular a complexidade de redes considerando outras medidas topológicas além do grau. Com isso em mãos, pretendemos investigar a possibilidade de existir redes que apresentam uma complexidade maior do que as redes conhecidas na literatura.

Referências:

1 COSTA, L. F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; VILLAS BOAS, P. R. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167–242, 2007. 2 COSTA, L. F. **What is a complex network** ? 2018. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/324312765_What_is_a_Complex_Network_CDT-2. Acesso em: 28 set. 2020.

PG82

Ultracold gases mixtures in mixed dimensions

CHAVIGURI, J. R. H. ; CARACANHAS, M. A.

richardhuch@gmail.com

In the current context of ultracold gases, a topic of quite relevance consists of mixtures of two superfluids, whose production challenge has been pursued since the experiments with 4He - 3He mixture. Due to the improvement of the cooling techniques and the possibility of varying the atomic interaction, bosonic (BEC) and fermionic ultracold gases were brought together to the state of quantum degeneration, allowing the study of mixtures where both species are superfluid. Our work consist in two parts. We treat a system composed of a BEC with vortex lattice, which overlaps with another weakly interacting ultracold bosonic gas, corresponding to the system impurities. A new trend in the field of ultracold atoms has been to introduce artificial dynamics into the static optical lattice to better simulate the solid-state crystals in the condensed matter models. With our system, however, we provide a solution to this problem, where the dynamics naturally come with the normal modes of the vortex lattice. We explored the properties of the lattice impurities, including their long-range interaction mediated by Tkachenko phonons, and the density-hopping effects. The vortex lattice also covers the new challenges that have emerged in the field of ultracold atoms in an optical lattice, whose configuration has been intensively explored in the direction of providing new quantum phases for the trapped species (1), which goes beyond the superfluid and Mott insulator phases, already observed in the experiments. We showed the possibility to obtain quantum-phase transitions in the vortex lattice with the adjustment of atomic scattering length, associated with the selective absorption imaging technique to characterize the state of the trapped sample. In the second part, we study a mixture of Fermi-Bose ultracold gases in mixed dimensions (2), based on a recent experimental realization (3), where the mixing between two bosons was performed using a 1D optical lattice, coupled with a 3D harmonic trap. Due to the selectivity of optical potentials, while one species is trapped in the 2D planes of the optical lattice, the other species see only the external dipole trap in 3D. The 2D-3D configuration provides greater experimental flexibility regarding the variation of scattering atomic between species, with the resonances induced by the confinement. We particularize the system, characterizing the impurity diffusion over the influence of the degenerate fermionic polarized gas (DFG) in 2D, besides the background of condensed bosons in 3D. We analyzed the behavior of this impurity, which lives in 2D, interacting with the BEC in 2D and 3D respectively. Depending on the bath in which it is immersed, impurity results in a quasi-particle called Polaron. The theoretical model employed consists of the perturbation theory formalism associated with Green's functions. This model allows us to understand suitably the Polaron behavior, which is well characterized by mean its spectral function. In this way, we can evaluate the effective energy, reduced mass, lifetime, and residue of the impurity.

Referências:

1 LEWENSTEIN, M.; SANPERA, A.; AHUFINGER, V. **Ultracold atoms in optical lattices** : simulating quantum many-body systems. Oxford: Oxford University Press, 2012. 2 CARACANHAS, M. A.; SCHRECK, F.; SMITH, C. M. Fermi-Bose mixtures in mixed dimensions. **New Journal of Physics** , v. 19, n. 11, p. 115011-1-115011-20, 2017. 3 LAMPORESI, G. *et al* . Scattering in mixed dimensions with ultracold gases. **Physical Review Letters** , v. 104, n. 15, p. 153202-1-153202-4, 2010.

PG83

Pseudo-hermiticidade: hamiltonianos não-hermitianos com espectro real além da \mathcal{PT} -simetria

SILVA, L. ; DOURADO, R. ; MOUSSA, M.

silvaluis@usp.br

Os hamiltonianos não-hermitianos, durante um longo tempo, foram introduzidos em modelos na mecânica quântica de forma totalmente heurística e fenomenológica. O problema desta abordagem está no fato de que hamiltonianos não-hermitianos, em geral, levam a autovalores não-reais e a uma evolução temporal não-unitária. Em 1998, Bender e Boettcher (1) verificaram que a família de hamiltonianos não-hermitianos $H = p^2 - (ix)^\epsilon$ apresentava autovalores reais e a justificativa foi atribuída a simetria \mathcal{PT} que tais hamiltonianos exibem. Os desenvolvimentos de Mostafazadeh (2), em seguida, alicerçaram os hamiltonianos não-hermitianos e \mathcal{PT} -simétricos como um caso particular de uma estrutura matemática de operadores pseudo-hermitianos. Demonstrou-se também que hamiltonianos pseudo-hermitianos apresentam autovalores reais, possuem uma evolução unitária e exibem alguma simetria antiunitária, não necessariamente a \mathcal{PT} . A ideia geral da teoria é construir um novo espaço de Hilbert \mathcal{H}_Θ , que difere do original pela definição do produto interno $\langle \psi | \chi \rangle_\Theta \equiv \langle \psi | \Theta | \chi \rangle$, caracterizado por um operador hermitiano Θ , denominado operador métrica, de modo que o hamiltoniano H torna-se hermitiano. No entanto, desde o trabalho de Bender-Boettcher (1), a \mathcal{PT} -simetria ainda permanece dominando as principais pesquisas sobre hamiltonianos não-hermitianos. Neste trabalho, a relação de pseudo-hermiticidade será utilizada para encontrar as simetrias, possivelmente mais gerais que a \mathcal{PT} , de hamiltonianos pseudo-hermitianos. Para isso, objetiva-se estudar o hamiltoniano dependente do tempo $H = \sum_k (\alpha_k x^k + \beta_k p^k)$, verificando quais as condições sobre as funções temporais complexas $\alpha_k(t)$ e $\beta_k(t)$ que definem um hamiltoniano pseudo-hermitiano. Para o caso simples independente do tempo do oscilador harmônico com bombeamento linear (3) $H = \omega a^\dagger a + \alpha a + \beta a^\dagger$ e com bombeamento paramétrico $H = \omega a^\dagger a + \alpha a^2 + \beta a^{\dagger 2}$, escrito em termos dos operadores de levantamento a^\dagger e abaixamento a , as condições que definem um hamiltoniano pseudo-hermitiano mostram que ambos sistemas devem exibir uma simetria $e^{-i\phi a^\dagger} \mathcal{T}$, uma reversão temporal seguida de uma rotação de um ângulo ϕ no espaço de fase. Esta operação é, de fato, mais geral que a \mathcal{PT} -simetria, que pode ser recuperada fazendo $\phi = \pi$.

Referências:

1 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having \mathcal{PT} - symmetry. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 24, p. 5243-5246, 1998. 2 MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-hermiticity versus \mathcal{PT} - symmetry: the necessary condition for the reality of the spectrum of a non-hermitian hamiltonian. **Journal of Mathematical Physics**, v. 43, n. 1, p. 205-214, 2002. 3 FRING, A.; MOUSSA, M. H. Y. Unitary quantum evolution for time-dependent quasi-hermitian systems with nonobservable hamiltonians. **Physical Review A**, v. 93, n. 4, p. 042114-1-042114-5, 2016.

PG84

Thermoelectric properties of a nanostructured device

FERRARI, A. L. ; OLIVEIRA, L. N. D.

analuizarfferrari@gmail.com

We computed transport properties and studied their universality in a nanostructured elementary device. The computation is based on a procedure we developed: an alternative formulation to the Numerical Renormalization Group (NRG) method. (1) We direct our attention to the side-coupled device (SCD), a quantum wire side-coupled to a quantum dot. Experimentally, we control the electronic occupation of the dot by a gate potential and measure the transport properties (electrical and thermal conductances and thermopower) as functions of the temperature and gate potential. Theoretically, the Anderson impurity Hamiltonian models the system. In the Kondo regime of the Anderson model, previous studies (2) have shown the thermal dependence of the conductance to map linearly on a universal function of the temperature scaled by the Kondo temperature. We extended the analysis to the other two transport properties. Furthermore, we built the alternative NRG method with a real-space construction, contrasting with the momentum-space discretization in the original formulation.

Referências:

1 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. **Reviews of Modern Physics** , v. 47, n. 4, p. 773-840, 1975. 2 YOSHIDA, M.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance for the single-electron transistor. **Physical Review B** , v. 80, n. 23, p. 235317-1-235317-22, 2009.

PG85

Different molecular interactions and in vitro cytotoxicity of PLGA-ALA nanoparticle systems

SILVA, G. R. D. ; SANTOS, A. L. D. ; SANTOS, M. C. D. ; SANTOS, S. C. D. ; LIMA, V. R. D. ; INADA, N. M.

geisiane.silva@usp.br

Currently, research allied to the pharmaceutical industry develops systems for improved treatments more effective and less invasive for many types of cancers, including non-melanoma skin cancer (NMSC). (1) From this fact, two nanoparticle systems (NP) were synthesized, using the single (NP1) or double emulsion (NP2) method, from the biodegradable poly (lactic-co-glycolic acid) copolymer (PLGA) for potential use in a controlled delivery system of the prodrug 5-aminolevulinic acid (ALA). The NP-PLGA-ALA systems aims to improve the topical action of photodynamic therapy (PDT) for deeper NMSC. (2) The initial pH of NP-PLGA-ALA (NP1) was (4.66 ± 0.02), with mean size by Dynamic Light Scattering (469.1 ± 5.2) nm and the respective zeta potential (-4.62 ± 0.07) mV. The NP2 system was characterized with pH (4.25 ± 0.03), medium size ($545,9 \pm 8.9$) nm and the respective zeta potential (-0.46 ± 0.40) mV. The formation of these nanosystems was investigated through Scanning Electron Microscopy (SEM-FEG), and characterized by FTIR and NMR. The NP have a non-rough surface, polydispersed and spherical. Considering the molecular interactions, it was possible to investigate that 5-ALA gives different characteristics to the systems. In addition, it was possible to observe that ALA is adsorbed on the NP core shell and has different interactions with the PVA surfactant for each emulsion studied, which implies possible differences in the release of the drug and in the cytotoxicity of each system. In vitro cytotoxicity tests with A431 NMSC cells, and irradiated with 8 J.cm⁻² energy, showed that NP1 increased the cells death by 43.23% compared to the control, while that NP2 induced by 51.72%, and both of which nanoparticle system are promising for topical PDT.

Referências:

1AISHWARYA, S.; SANJAY, K. R. Conjugation study of 5-aminolevulinic acid with microbial synthesized gold nanoparticles to evaluate its effect on skin melanoma and epidermoid carcinoma cell lines using photodynamic cancer therapy. **Gold Bulletin**, v. 51, n. 1-2, p. 11-19, 2018. 2 SHI, L. *et al.* In vitro evaluation of 5-aminolevulinic acid (ALA) loaded PLGA nanoparticles. **International Journal of Nanomedicine**, v. 8. n. 1, p. 2669-2676, 2013.

PG86

Simulation of extensive air showers and its detection

ARBELETTCHE, L. ; SOUZA, V. D.

luan.arbeletche@ifsc.usp.br

Extensive Air Showers (EAS) are particle cascades that develop in the atmosphere triggered by the collision of an energetic cosmic particle with an air nucleus. The observable properties of these cascades allow ground-based detectors to explore an energy window of cosmic messengers which would be inaccessible otherwise due to limited statistics of direct detectors. This indirect method comes with the cost of requiring a deep knowledge of the processes involved in EAS development to extract useful information about the primary particle, the one that triggered the shower. This thesis contributes to this scenario by providing simulation studies and parametrizations of EAS observables required by current and future Ultra-High Energy Cosmic Rays (UHECR) and Gamma-ray observatories. Currently, one of the largest challenges in UHECR physics is to determine the relative abundances of primary particle species. Experimentally, the most useful variable for particle discrimination is the depth at which a shower reaches its maximum number of particles (X_{max}). In this work, the statistical fluctuations of X_{max} are studied and parametrized. Three functional forms are analyzed and it is found that the Generalized Gumbel distribution provides the best description for a wide range of primary energies and masses. All three functions are parametrized in terms of primary energy and mass. This work has proven to be useful in the analysis of UHECR sources (1) and in the study of prospects for future observatories. (2) A second study is presented here concerning the emission of Cherenkov light in EAS. The contribution by Cherenkov photons dominates the signal in Gamma-ray telescopes at the ground as well as it is becoming very important in current fluorescence detectors of UHECR. To understand how the intensity of Cherenkov radiation changes due to the stage of development of a shower and also due to the observation angle is mandatory to reconstruct the properties of the primary particle. In this context, a parametrization of the angular distribution of Cherenkov photons in EAS is performed in which, for the first time, a unified description of the small and large angular regions is presented in terms of a physically motivated functional form. Simulated gamma-ray and proton showers with energies in the TeV to EeV region are used to constrain the parameters of the proposed function. In the end, the description obtained is such that it overcomes in precision previous parametrizations. Other contributions of this thesis include the shower simulations used in the proposal of an innovative method for the measurement of X_{max} in imaging gamma-ray telescopes (3) and a collaboration with the analysis and simulation group of the Cherenkov Telescope Array in a study of the systematic uncertainties related to the modeling of hadronic interactions in shower simulations.

Referências:

1 MUZIO, M. S.; UNGER, M; FARRAR, G. R. Progress towards characterizing ultrahigh energy cosmic ray sources. **Physical Review D** , v. 100, n. 10, p. 103008, 2019. 2 ANCHORDOQUI, L. A. *et al* . Performance and science reach of the probe of extreme multimessenger astrophysics for ultrahigh-energy particles. **Physical Review D** , v. 101, n. 2, p. 023012, 2020. 3 GILER, A. D. *et al* . Measuring the depth of shower maximum of extensive air showers using Cherenkov light. **Astroparticle Physics** , v. 124, n. 10, p. 102508, 2021.

PG87

Estudos estruturais e funcionais da enzima EfTenA: uma tiaminase tipo II de *Enterococcus faecalis*

GUTIERREZ, R. R. F. ; NASCIMENTO, A. S. ; WRENGER, C.

raissa.gutierrez@usp.br

A resistência bacteriana aos antibióticos disponíveis para uso terapêutico é um problema mundial. Por isso, o desenvolvimento de novas classes de antibióticos e a descoberta de novos alvos moleculares são importantes ao combate às bactérias multirresistentes. (1) A proposta deste projeto é compreender e caracterizar as enzimas envolvidas na biossíntese da vitamina B1 (tiamina) da bactéria patogênica *Enterococcus faecalis* com o intuito de validar novos alvos moleculares para o desenvolvimento de antibióticos. O pirofosfato de tiamina é essencial para a vida de todos os organismos, sendo que a maioria das bactérias são capazes de produzir a tiamina, mas os humanos a obtêm exclusivamente pela dieta. Assim, o bloqueio da via de biossíntese de tiamina pode ser uma boa estratégia ao combate de bactérias resistentes, uma vez que essa via está ausente em humanos. (2) Acredita-se que a enzima TenA faz parte da via de salvamento e reciclagem dos precursores de tiamina, pois ela pode hidrolisar a tiamina nos precursores 4-amino-5-hidroximetil-2-metil pirimidina (HMP) e 5-(2-hidroxi etil)-4-metil tiazol (THZ) e também pode desaminar a aminopirimidina para suprir a via biossintética com HMP. (3) Neste estudo, a interação da enzima EfTenA recombinante com os compostos tiamina, monofosfato de tiamina (TMP) e pirofosfato de tiamina (TPP) foram avaliados pelo ensaio de estabilidade térmica por Fluorimetria Diferencial (DSF) e, em seguida, testes preliminares de atividade bioquímica de degradação utilizando os três compostos como substrato foram realizados por método colorimétrico após a reação de oxidação em tiocromo. O ensaio de DSF mostrou que a estabilidade térmica da enzima EfTenA aumenta com a adição de tiamina, TMP e TPP na solução, porém a o aumento da temperatura de *melting* é menor para o TMP e TPP. Os testes iniciais de atividade mostraram que EfTenA recombinante é capaz de hidrolisar a tiamina e, com menor atividade, o TMP. Uma atividade residual foi identificada para o TPP, mostrando que a tolerância do sítio ativo diminui significativamente a cada adição de grupos fosfato à molécula. Um conjunto de dados de difração de raio-X de um cristal de EfTenA com o ligante TMP, coletado *in-house*, está sendo analisado. Essa nova estrutura será resolvida por substituição molecular a partir da estrutura da EfTenA já determinada. Testes de otimização de cinética enzimática também estão em andamento para definir os parâmetros cinéticos de EfTenA. Não há relato na literatura para atividade tiaminase II de enzimas TenA sobre TMP e TPP, e também não há relatos sobre a afinidade das homólogas com estes compostos. Portanto, os resultados obtidos permitirão reescrever o papel de TenA na via de biossíntese da tiamina em bactérias.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Global action plan on antimicrobial resistance**. Geneva: WHO, 2015. 19 p. Disponível em: https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/193736/9789241509763_eng.pdf?sequence=1. Acesso em: 01 out. 2020.
- 2 MÜLLER, I. B.; HYDE, J. E.; WRENGER, C. Vitamin B metabolism in *Plasmodium falciparum* as a source of drug targets. **Trends in Parasitology**, v. 26, n. 1, p. 35-43, 2010.
- 3 JENKINS, A. H. *et al*. A new thiamin salvage pathway. **Nature Chemical Biology**, v. 3, n. 8, p. 492-497, 2007.

PG88

Métodos computacionais para detecção de toxicidade em *Tradescantia minima* por nanopartículas de prata (AgNPs) e cloreto de sódio (NaCl)

GAMBOA, C. G. ; BRUNO, O. M.

grosso@usp.br

Os efeitos tóxicos causados por agentes físicos e químicos são um problema potencial de importância agrícola, desde o cloreto de sódio (NaCl) até as frequentemente muito usadas nanopartículas de prata (AgNP). Embora seja claro que os efeitos tóxicos do cloreto de sódio (NaCl) em altas concentrações podem atuar devido ao estresse hídrico devido à diminuição do potencial osmótico, por outro lado também podem ser devido ao efeito tóxico dos íons (1); Ao contrário da salinidade, as vias metabólicas dos efeitos tóxicos causados pelas nanopartículas de prata (AgNPs) nas plantas ainda não estão muito claras e as pesquisas ainda estão em andamento, mas há antecedentes e propostas de que podem causar vários tipos de danos em plantas, como citotoxicidade e genotoxicidade. (2) Várias técnicas computacionais fizeram progressos significativos no processamento de imagens, especialmente as redes neurais convolucionais (CNN); Podem ser muito úteis na assistência técnica para detecção automática de doenças (3) ou também detecção de toxicidade. Para gerar as imagens necessárias ao treinamento de redes neurais artificiais (CNN), são realizados experimentos com temperatura de 25 - 26 ° C, fotoperíodo de 12:12 e umidade relativa de 65%. Além disso, os experimentos são divididos em dois métodos, as plantas que são submetidas à toxicidade do cloreto de sódio (NaCl) são cultivadas em substrato Carolina Soil do Brasil, e as plantas tratadas com nanopartículas de prata (AgNPs) são cultivadas *in vitro* e ambos submetidos a tratamentos de toxicidade nas mesmas condições em que foram inicialmente cultivados. As plantas de *Tradescantia minima* submetidas a testes de toxicidade com cloreto de sódio (NaCl) apresentaram menor crescimento em altas concentrações, ao contrário das plantas tratadas com nanopartículas de prata (AgNPs), não houve diferença no crescimento das plantas. Além disso, as folhas das plantas tratadas com cloreto de sódio apresentavam sinais de desidratação (plasmólise). Nas análises preliminares com redes neurais convolucionais (CNN) dos testes realizados com NaCl, a precisão de classificação das imagens foi de apenas 35%.

Referências:

1 SALAS, J. A. *et al* . Variación en el índice y densidad estomática en plantas de tomate (*Lycopersicon esculentum* Mill.) sometidas a tratamientos salinos. **Bioagro** , v. 13, n. 3, p. 99-104. 2001. 2 BECARO, A. A. **Estudos de atividade antimicrobiana, de migração e de toxicidade de nanopartículas de prata aplicada em filmes poliméricos** . 2014. Tese (Doutorado em Biotecnologia) - Universidade Federal de São Carlos. São Carlos, 2014. 3 BOULENT, J. Convolutional neural networks for the automatic identification of plant diseases. **Frontiers in Plant Science**, v.10,n.941,2019. DOI 10.3389/fpls.2019.00941.

PG89

Avaliação do potencial fotocatalítico de nanocubos de SrTiO₃ dopados com Mo para produção de H₂ combustível

CENTURION, H. A. ; GONÇALVES, R. V.

higorcenturion@usp.br

A demanda energética inerente ao desenvolvimento tecnológico obtido pela humanidade ao longo dos séculos foi e ainda é majoritariamente suprida pelo uso de combustíveis fósseis. Contudo, o massivo uso desta matriz energética a está levando ao esgotamento das reservas naturais, além de suscitar sérios problemas ambientais como a emissão de gases de efeito estufa. Sendo assim, existe um crescente interesse por fontes energéticas sustentáveis, como a solar. Neste contexto, o hidrogênio obtido pela quebra fotocatalítica da água (water splitting), utilizando um semicondutor e luz natural, é um importante candidato para o armazenamento e utilização da energia solar. (1) Dentre os possíveis semicondutores para realizar o processo de water splitting, podemos destacar o SrTiO₃ (STO), devido a posições adequadas das bandas de valência e condução para oxidar e reduzir a molécula de água, estabilidade química em meio aquoso, bem como abundância dos elementos que o compõe. (2) Embora apresente excelentes propriedades físico-químicas, o SrTiO₃ possui elevada taxa de recombinação do par de elétrons e buracos além de apresentar elevado bandgap de 3.2 eV, absorvendo apenas luz UV, que corresponde a 4% do espectro solar. Sendo assim, é necessário adotar algumas estratégias que contornem as limitações supracitadas e melhorar a atividade fotocatalítica do STO, como a utilização de dopantes para aproveitar parte da luz visível bem como depositar co-catalizadores metálicos para melhorar a transferência de cargas.(3) Neste contexto, este trabalho busca ampliar a produção de H₂, por meio da dopagem do SrTiO₃ com Mo, além de utilizar níquel como co-catalizador em sua superfície, depositado via magnetron sputtering. Nanocubos de SrTiO₃ puro e dopado foram sintetizados via método do sal fundido e caracterizados por DRX, MEV, MET, UV-Vis e XPS. A evolução de hidrogênio foi realizada com nanocubos de SrTiO₃ suspensos em solução aquosa de 20 vol% de metanol. A configuração com maior otimização do SrTiO₃ dopado com Mo e decorado com níquel, apresentou uma taxa de evolução de H₂ de 15,1 [U+F06D] mol h⁻¹, sendo 34 vezes maior que o SrTiO₃ puro.

Referências:

- 1 GONÇALVES, R. V. *et al.* Photocatalytic water splitting by suspended semiconductor particles. *In* : SOUZA, F. L; LEITE, E. (ed.). **Nanoenergy** : nanotechnology applied for energy production. Cham: Springer, 2018. p. 107-140.
- 2 MA, X. *et al.* Use of surface photovoltage spectroscopy to probe energy levels and charge carrier dynamics in transition metal (Ni, Cu, Fe, Mn, Rh) doped SrTiO₃ photocatalysts for H₂ evolution from water. **Journal of Material Chemistry A** , v. 6, n. 14, p. 5774-5781, 2018.
- 3 KANG, H. W.; PARK, S. B. Effects of Mo sources on Mo doped SrTiO₃ powder prepared by spray pyrolysis for H₂ evolution under visible light irradiation, **Materials Science Engineering B** , v. 211, p. 67-74, Sept. 2016. DOI 10.1016/j.mseb.2016.06.006.

PG90

O papel do emaranhamento em um motor de Szilard quântico

SILVA, L. D. A. D. J. ; BRITO, F. B. D.

lais.anjos@ifsc.usp.br

A área da termodinâmica quântica busca compreender e verificar sob quais condições os princípios da termodinâmica são válidos em sistemas quânticos, já que esses sistemas não estão no regime macroscópico onde a validade desses princípios não é contestada. Os estudos realizados nessa área trouxeram a necessidade de repensar alguns conceitos físicos básicos como o calor e o trabalho. Esse projeto consiste em utilizar os conhecimentos obtidos pela área da termodinâmica quântica para estudar o funcionamento do motor de Szilard e verificar qual papel a coerência quântica desempenha na evolução desse sistema. Para realizar esse estudo, primeiramente estudamos as algumas definições de trabalho e calor para um sistema aberto acoplado fracamente com um conjunto de reservatórios térmicos.(1) Em seguida, buscamos entender a dinâmica dos sistemas abertos e como construir e obter informações da equação mestra que rege a dinâmica desses sistemas.(2) Também verificamos como o emaranhamento surge no estado de um sistema composto por um qubit interagindo com um conjunto infinito de osciladores quânticos multimodais e também como essa interação pode levar a descoerência no estado do qubit. (3) O próximo passo desse projeto será estudar o funcionamento do motor de Szilard e verificar se é possível utilizar a coerência quântica para aprimorar o funcionamento desse motor.

Referências:

1 ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. **Journal of Physics A** : mathematical and general, v. 12, n. 5, p. L103, 1979. 2 BREUER, H.P.; *et al* . **The theory of open quantum systems** .Oxford: Oxford University Press on Demand, 2002. 3 PALMA, G. M.; SUOMINEN, K -A.; EKERT, A. Quantum computers and dissipation, **Proceedings of the Royal Society of London**. Series A : mathematical, physical and engineering sciences, v. 452, n.1946, p. 567–584,1996.

PG91

Simulação de Armadilha Magneto-Óptica em geometrias não-convencionais operando próximo ao limite fotônico

SANTOS, B. N. ; HENN, E.

bruno.nicolau.santos@usp.br

Os métodos de *resfriamento à laser* e armadilhamento foram revolucionários para o estudo de *átomos frios*, eles possibilitaram a confirmação experimental do quinto estado da matéria, em um regime ultra-frio, conhecido como *Condensação de Bose-Einstein*, o qual foi premiado com o Nobel de Física em 1997. A Armadilha Magneto-Óptica (1), ou do inglês *Magneto-Optical Traps (MOT)*, é uma parte fundamental desses experimentos constituída de um campo magnético quadripolar e de uma geometria de feixes, sua função é de resfriar e aprisionar nuvens ultra-frias de matéria até temperaturas na ordem de μK através do espalhamento de fótons em transições ópticas dipolares. Dado a razão $\eta = \Gamma/\omega_R$, com Γ sendo a largura de linha da transição utilizada e $\omega_R = (4\pi^2\hbar)/(2m\lambda^2)$ a frequência de deslocamento devido ao recuo fotônico, na aproximação $\eta \approx 1$ obtemos a chamada Armadilha Magneto-Óptica de linha estreita (2), ou do inglês *narrow-line MOT (nMOT)*, cuja dinâmica é limitada pelo recuo fotônico. Nesse regime, também chamado de regime quântico, o espalhamento individual de fótons é relevante para a dinâmica em questão. Quando $\eta \gg 1$, a armadilha é bem descrita por um regime semi-clássico, no qual o comportamento médio dos espalhamentos predomina. A criação de um modelo quantitativo para um MOT é um grande desafio devido aos feixes polarizados em geometrias tridimensionais, campo magnético quadripolar e efeitos de bombeamento óptico. Portanto, propomos uma simulação (3) da dinâmica na armadilha utilizando o *método de Monte Carlo*, no qual consideramos o espalhamento de fótons e a solução estacionária das *equações ópticas de Bloch*. Nosso objetivo é analisar configurações não usuais com três e quatro feixes visando a busca por parâmetros que permitem a realização experimental otimizada de tais geometrias, além disso desejamos observar e comparar os regimes semi-clássico e quântico.

Referências:

1 RAAB, E. L., *et al* . Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. **Physical Review Letters** , v.59, n..23,p.2631,1987. 2 LOFTUS, T. H. *et a* l.Narrow line cooling and momentum-space crystals. **Physical Review A** , v.70,n.6, p.063413,2004. 3 HANLEY, R. K., *et al* . Quantitative simulation of a magneto-optical trap operating near the photon recoil limit. **Journal of Modern Optics** ,v, 65, n..5-6,p. 667-676,2018.

PG92

Radiação de cargas uniformemente aceleradas

WESTIN, R.

raian.westin@usp.br

Um dos resultados mais importantes e famosos do Eletromagnetismo Clássico é que cargas em trajetórias aceleradas devem emitir radiação eletromagnética com uma potência proporcional ao quadrado da sua aceleração ($P \propto a^2$). (1) Entretanto, com a comprovação da Teoria da Relatividade Geral de Einstein, que tem como hipótese que não deve ser possível (a partir de experimentos locais) diferenciar um referencial uniformemente acelerado na ausência de campos gravitacionais de um parado em um campo gravitacional, foi natural que surgissem perguntas sobre a validade dessa potência irradiada, e como conciliar isso com o fato de que uma carga parada na superfície da Terra não emite radiação por exemplo. Um dos primeiros pesquisadores a oferecer uma resposta completa para esse aparente paradoxo foi o Boulware, que publicou, em 1980, um artigo mostrando que, do ponto de vista clássico (ou seja, com as Equações de Maxwell juntamente com a Teoria da Relatividade), a noção de radiação é dependente de referencial (2), e nesse caso em específico, um observador acelerado junto com a carga elétrica não seria capaz de medir a radiação que é medida por um observador inercial. Mais recentemente, de 1992 até o presente momento, foram publicados vários artigos fazendo a análise desse problema de um ponto de vista quântico, e foi mostrado que a Radiação Unruh (banho térmico medido por observadores acelerados) exerce um papel muito importante em conciliar os resultados medidos por observadores inerciais com os medidos pelos observadores acelerados. (3) Como esses resultados não são amplamente conhecidos na comunidade física, esse trabalho teve como objetivo reunir (e entender) todos esses resultados já conhecidos relacionados à radiação de cargas aceleradas, assim como deixar o estudante a par das discussões atuais do assunto para que esteja preparado para fazer uma contribuição original nas "pontas soltas" que ainda existem nesse tema durante o doutorado.

Referências:

- 1 JACKSON, J. D. **Classical electrodynamics**. New York: John Wiley sons. Inc., 1999.
- 2 BOULWARE, D. G. Radiation from a uniformly accelerated charge. **Annals of Physics**, v. 124, n. 1, p. 169–188, 1980.
- 3 HIGUCHI, A.; MATSAS, G.; SUDARSKY, D. Bremsstrahlung and fulling-davies-unruhthermal bath. **Physical Review D**, v. 46, n. 8, p. 3450, 1992.

PG93

Laser de interação efetiva

OLIVEIRA NETO, F. de ; YOUSSEF, M.

A teoria do laser é uma das principais no desenvolvimento da ótica quântica, em particular nas interações radiação-matéria. Baseada no trabalho teórico arquitetado por Townes e Schawlow (1), o primeiro laser foi construído na década de 1960, e desde então exerce um papel fundamental nas áreas de física e suas tecnologias. Neste trabalho apresentamos um esquema de níveis atômicos a partir do qual construímos, mediante os protocolos de James (2) para interações efetivas, um Hamiltoniano Efetivo contendo os termos de Jaynes-Cummings (JC) e Anti Jaynes-Cummings, com acoplamentos diferentes. Posteriormente aplicamos uma transformação canônica com o objetivo de obtermos um Hamiltoniano na forma de JC para fazermos uso do mesmo inserindo-o no contexto da teoria do laser, onde propomos uma interação sistema-reservatório na forma de Lindblad (3) nesse novo espaço. Tendo-se conhecida a solução para esta equação mestra como sendo o estado coerente, basta reescrevermos esse estado na base de Fock, que nos mostra o estado de vácuo comprimido.

Referências:

1 SCHAWLOW, A. L.; TOWNES, C. Infrared and optical masers. **Physical Review** , v. 112, n. 6 , p. 1940, 1958 2 JAMES, D. F. V.; JONATHAN, J. Effective Hamiltonian theory and its applications in quantum information. **Canadian Journal of Physics** , v. 85, n. 6, p. 625-632, 2007. 3 BREUER, H. P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems** .Oxford: Oxford University Press, 2002.

PG94

Cluster epa de *Enterococcus faecalis*

DANTAS, L. ; NASCIMENTO, A. S.

As proteínas epal e epaOX de *Enterococcus faecalis* eram inicialmente o foco de estudo. Elas são categorizadas como glicosiltransferases (GT2), as quais estão envolvidas na síntese e integridade de biofilmes produzidos por *E. faecalis*. (1-2) O estudo abrangendo a caracterização estrutural e enzimáticas dessas duas GT2 foi motivado por biofilmes serem um dos facilitadores da aquisição de resistência bacteriana a antibióticos, em conjunto com a lacuna de informação disponível sobre *E. faecalis* quando comparada com outras espécies bacterianas. As enzimas epal e epaOX se mostraram insolúveis, mesmo após tentativas de intensificar a solubilidade delas, como expressões em vetores e cepas de expressão distintas, adição de detergentes em solução, reenovelamento com SDS e expressão de versões truncadas das enzimas. Os genes que codificam as proteínas epal e epaOX fazem parte do cluster epa (enterococcal polysaccharide antigen), que agrupam produtos gênicos parcialmente responsáveis pela decoração de polissacarídeos da parede celular do gênero *Enterococcus*. As cadeias de açúcares se configuram como um fator de patogenicidade, auxiliando na adesão celular a superfícies e na estruturação da morfologia celular, assim como elas constituem biofilmes. Sendo assim, duas proteínas do cluster epa foram adicionadas ao trabalho: epaB, também uma glicosiltransferase que atua no transporte de açúcares, e epaE, uma possível glicose-1-fosfato timidiltransferase (3), responsável pela síntese de um precursor da L-ramnose. Experimentos iniciais com essas proteínas envolveram a fusão das proteínas a GFP (Green Fluorescent Protein) para localização celular das mesmas através da microscopia confocal. Spoiler: a epaB é insolúvel, tal como a epal e epaOX, mas a epaE apresenta grau de solubilidade o suficiente para a caracterização estrutural e enzimática.

Referências:

- 1 DALE, J. L. ; CAGNASSO, J.; PHAN, C. Q.; BARNES, A. M.; DUNNY, G. M. Multiple roles for *Enterococcus faecalis* glycosyltransferases in biofilm-associated antibiotic resistance, cell envelope integrity, and conjugative transfer. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy** , v. 59, n.7, p. 4094–4105, 2015.
- 2 DALE, J. L.; NILSON, A. M.; BARNES, A. M.; DUNNY, G. M. Restructuring of *enterococcus faecalis* biofilm architecture in response to antibiotic-induced stress, **NPJ Biofilms and Microbiomes** , v. 3, n. 1, p. 1–9, 2017.
- 3 TENG, F.; SINGH, K. V. ; BOURGOGNE, A.; ZENG, J. Further characterization of the epa gene cluster and Epa polysaccharides of *enterococcus faecalis*, **Infection and Immunity** , v. 77, n. 9, p. 3759–3767, 2009.

PG95

Estudos de nanotermodinâmica e informação em pinças ópticas

KAMIZAKI, L.

lucas.kamizaki@usp.br

Na segunda metade do século XIX, James Maxwell propôs um experimento mental, conhecido atualmente como demônio de Maxwell, com a finalidade de ilustrar o caráter estatístico da segunda lei da termodinâmica. O experimento consiste de uma caixa isolada contendo um gás ideal em equilíbrio térmico a uma temperatura T . O recipiente possui uma divisória, separando-o em duas partes, com uma portinhola controlada por um agente místico, mais tarde chamado de demônio de Maxwell. O demônio possui capacidade de medir as trajetórias e velocidades de cada partícula do gás, permitindo as com maior velocidade atravessarem para um dado lado da caixa e as mais lentas para o lado oposto. Assim, através deste controle ele cria uma diferença de temperatura entre os dois lados, violando a segunda lei da termodinâmica. Foi somente em 1929 que Leo Szilard formulou outro experimento imaginário que mostraria o papel do demônio de Maxwell com mais clareza, permitindo quantificar o trabalho obtido em um ciclo. Szilard encontrou que a informação obtida pelo demônio era proporcional ao trabalho realizado pelo sistema ao longo de um ciclo, conectando a informação obtida com o trabalho realizado pelo sistema. Com isso, ele mostrou que a informação tem um papel fundamental na resolução do demônio de Maxwell. Exatamente qual processo que era responsável por compensar o trabalho realizado foi palco de discussões nas décadas subsequentes com Brillouin, Landauer e Bennett, sendo que era considerado que o demônio foi exorcizado pelo argumento de que para apagar um bit de informação era necessário no mínimo um kBT de energia. No entanto, apenas nos últimos 30 anos que ferramentas teóricas e experimentais foram desenvolvidas, capazes de avançar a compreensão sobre este tema de forma significativa. Em particular, estamos interessados nas generalizações feitas por Takahiro Sagawa (1), em sua tese, da segunda lei da termodinâmica e das igualdades de Jarzynski e Crooks, quando submetidas a controle de feedback, ou seja, quando manipula-se informação no sistema no nível das flutuações térmicas, simulando o papel do demônio de Maxwell. Como plataforma experimental para investigarmos essas questões temos uma pinça óptica, desenvolvida nos últimos anos no Laboratório de Tecnologias Quânticas do IFSC (2), cujo potencial de aprisionamento óptico pode ser controlado dinamicamente,

Referências:

1 SAGAWA, T. Thermodynamics of information processing in small systems. **Progress of Theoretical Physics**, v. 127, n. 1, p. 1-56, 2012. 2 MARTINS, T. T. **Aprisionamento óptico de micropartículas e desenvolvimento de potenciais ópticos dinâmicos**. 2019. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019. DOI:10.11606/D.76.2019.tde-12092019-141442.

PG96

Distribuição de luz na pele com um objeto refletivo em sua superfície usando simulações de Monte Carlo

FORTUNATO, T. C. ; MORIYAMA, L. T.

therezacury@gmail.com

Quando a luz se propaga através de um meio turbido como tecido biológico, é conhecido que ocorrerão os fenômenos de reflexão especular, refração, espalhamento, absorção e reflexão difusa. As propriedades ópticas intrínsecas do tecido influenciam na propagação da luz, no entanto outro aspecto a ser levado em consideração é a geometria da fonte de luz. Com o avanço tecnológico da óptica biomédica, surgiram diversos dispositivos de iluminação para fins de fototerapia e fotodiagnóstico, cada um deles construído com geometrias e materiais específicos. Não é raro encontrar dispositivos contendo partes metálicas que devem ser colocados em contato com a superfície do tecido. Não encontramos referências ao efeito de um material altamente reflexivo em contato com a superfície do tecido biológico durante um procedimento médico. Este trabalho tem como objetivo utilizar simulações de Monte Carlo (MC) para avaliar como um material altamente reflexivo na superfície entre a pele e a fonte de luz pode influenciar na distribuição da luz no tecido. A implementação do MC utilizada, desenvolvida por Fang, chama-se Monte Carlos eXtreme (MCX)(1) e é baseada na unidade de processamento gráfico (GPU). Consideramos um tecido cutâneo contendo 6 camadas: epiderme, derme papilar, derme da rede sanguínea superior, derme reticular, derme da rede sanguínea profunda e gordura subcutânea.(2) Para simular o material reflexivo, vários coeficientes ópticos foram testados para obter os efeitos físicos da reflexão. Os resultados indicam que o material reflexivo altera a quantidade de luz dentro do tecido, sendo esse efeito mais pronunciado na primeira camada da pele, onde é possível detectar uma maior quantidade de luz absorvida. Este estudo mostra que a dosimetria de luz deve levar em consideração não apenas a quantidade de luz que sai da fonte, mas a quantidade de luz que é efetivamente acoplada ao tecido.

Referências:

1 FANG, Q.; BOAS, D. A. Monte Carlo simulation of photon migration in 3D turbid media accelerated by graphics processing units. **Optics Express** , v. 17, n. 22, p. 20178-20190, 2009. 2 LAROCHELLE, E. P. M. *et al* . Modeling PpIX effective light fluence at depths into the skin for PDT dose comparison. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy** , v. 25, p. 425-435, 2019. DOI: 10.1016/j.pdpdt.2019.01.022.

PG97

Chiroptical properties in plasmonic and high-refractive-index dielectric nanostructures

SARRIA, J. J. H. ; SALAZAR, J. R. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

jhon.hernandez@ifsc.usp.br

Enantiomers share the same stoichiometric molecular formula, but exhibit different biological and chemical activity when interacting with chiral media, like the human body. In pharmacology, for instance, the therapeutic effects of chiral drugs are often associated with a single enantiomer whereas the other is inactive and/or contributes to undesirable effects. Furthermore, the wrong chirality of chiral proteins may lead to toxic effects, believed to be one of the underlying causes of diseases such as Alzheimer's, Parkinson's, Huntington's, and type II diabetes. Therefore, developing new ways for reliable enantiodetection and enantioseparation of chiral drugs is relevant. Conventionally, circular dichroism (CD) spectroscopy is used to discriminate molecular chirality. However, this technique is limited to high concentrations or large analyte volumes due to the inherently weak molecular-chiroptical activity. Also relevant is that enantioseparation of chiral samples is performed through the use of other chiral samples, which may induce undesirable contamination. In this work, we exploit the electromagnetic resonant modes in chiral high-refractive-index nanostructures (1) for enhancing the chiral near-fields. Moreover, we show that the gradient optical-forces (2) can be used to manipulate spherical chiral nanoparticles with radius as small as 12 nm, which paves the way to efficiently manipulate nanometer-size biological chiral particles such as enzymes and other proteins.(3) Numerical results were obtained using the commercial electromagnetic simulation packages COMSOL Multiphysics and Lumerical FDTD.

Referências:

1 ZENIN, V. *et al* . Direct amplitude-phase near-field observation of higher-order anapole states. **Nano Letters** , v. 17,n.11, p. 7152 -7159,2017. 2 YANG, Z. *et al* . Enantioselective optical trapping of chiral nanoparticles with plasmonic tweezers. **ACS Photonics** ,v. 3, n.3,p. 304-309, 2016. 3 DAEHAN, Y. *et al* . Low-power optical trapping of nanoparticles and proteins with resonant coaxial nanoaperture using 10 nm Gap. **Nano Letters** , v. 18, n.6,p. 3637-3642,2018.

PG98

Análise exploratória de imagens do Biossensor aplicado ao diagnóstico de câncer de próstata

BRAZ, D. C. ; RODRIGUES, V. C. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

dcbraz@usp.br

Biossensores têm sido usados para identificar biomarcadores de câncer em células e fluidos corporais como a urina e sangue.(1) Em muitos casos a variabilidade das amostras biológicas requer que muitas medidas sejam realizadas, e essa grande quantidade de dados precisa ser tratada com técnicas computacionais.(2) Os dados gerados por biossensores são majoritariamente de medidas elétricas e eletroquímicas, sendo que recentemente passou-se a utilizar imagens de microscopia eletrônica.(3) O objetivo deste trabalho é apresentar resultados de uma análise exploratória do conjunto de imagens de um biossensor, que servirão para desenvolver classificadores baseados em aprendizado de máquina. Denominado de PCA3Au, o conjunto analisado é formado por imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) para um biossensor contendo nanopartículas de ouro. São 31 imagens em escala de cinza (8 bits) com resolução espacial de 1024x690 pixels, geradas a partir de 8 classes de experimentos. As classes 1 e 2 (*negative* e *blank*) não possuem o analito – biomarcador PCA3 para câncer de próstata – e as classes 3 a 8 possuem diferentes concentrações do analito ($\mu\text{mol/L}$): 1E-5, 1E-4, 1E-3, 1E-2, 1E-1 e 1E0. A análise foi realizada com 4 experimentos computacionais para verificar as características das imagens, com comparação intra e interclasses. Observou-se uma mudança no padrão de textura com o aumento da concentração do analito evidenciada pela diminuição da granularidade das regiões de maior intensidade. As medidas estatísticas de centralidade, dispersão e quartis das intensidades dos pixels permitiram verificar que médias e medianas possuem valores próximos entre si (aprox. 128) com um razoável desvio-padrão. As distribuições das intensidades são moderadamente assimétricas positivas e negativas e relativamente achatadas, e há pequena presença de intensidades anômalas e grande similaridade entre os intervalos interquartis das classes com analito. A avaliação das dissimilaridades entre as imagens foi realizada a partir de 5 medidas de distância entre os pixels, constatando-se grande dissimilaridade e, especificamente, uma diferença significativa entre as classes sem e com analito. As frequências espaciais (ciclos/pixel) das intensidades estão distribuídas em um intervalo de baixos valores (13.956 – 28.399). Também aqui verificou-se uma diferença significativa entre as classes sem e com analito. Da análise, pode-se obter o conhecimento necessário sobre o conjunto de imagens que permitirá planejar os experimentos com algoritmos de aprendizado de máquina para obter classificadores eficientes no diagnóstico de câncer de próstata.

Referências:

1 SOARES, J. C.; SOARES, A. C.; RODRIGUES, V. C.; MELENDEZ, M. E.; SANTOS, A. C.; FARIA, E. F.; REIS, R. M.; CARVALHO, A. L.; OLIVEIRA, O. N. Detection of the prostate cancer Biomarker PCA3 with electrochemical and impedance-based biosensors. **ACS Applied Materials and Interfaces** , v. 11, n. 50, p. 46645–46650, 2019. DOI: 10.1021/acsami.9b19180. 2 HAN, J.; KAMBER, M; PEI, J. **Data mining** . 3rd ed. Burlington: Morgan Kaufmann, 2012. 3 RODRIGUES, V. C. *et al* . Electrochemical and optical detection and machine learning applied to images of genosensors for diagnosis of prostate cancer with the biomarker PCA3. **Talanta** , v. 222, n. 2021, p. 121444-1-121444-10, 2021. DOI: 10.1016/j.talanta.2020.121444.

PG99

Maleabilidade de redes complexas ao longo de sucessivas remoções de arestas

FURUTA, R. H. M. ; COSTA, L. D. F.

roberto.furuta@usp.br

O estudo de sistemas de entidades interagentes, conhecidos como sistemas complexos, ganha cada vez mais destaque nas diversas áreas da ciência. A natureza desses sistemas permite que sejam modelados usando grafos, que nesse contexto são referidos como redes complexas. As redes são estudadas por duas perspectivas: topologia e dinâmica. No estudo da topologia, analisa-se a estrutura da rede (entidades e suas conexões), enquanto que, no estudo da dinâmica, analisam-se processos que ocorrem sobre essa estrutura (como procedimentos que percorrem a rede). (1) Considerando que a estrutura de grande parte das redes se modifica ao longo do tempo, surge o interesse em estudar o efeito de modificações topológicas sobre suas propriedades, sejam essas topológicas ou das dinâmicas. Para caracterizar a diversidade de topologias resultantes de modificações na rede, em 2018, foi proposta uma medida nomeada maleabilidade (2), calculada por meio da exponencial da entropia das probabilidades de cada desdobramento possível. Neste trabalho, pretende-se calcular a maleabilidade de redes ao longo de sucessivas remoções de arestas e analisar seus comportamentos. Para isso utilizamos redes modelos dirigidas e não dirigidas e avaliamos a influência do critério de seleção da aresta removida. Como parâmetro de avaliação do desdobramento da rede, utilizou-se a medida de coeficiente de agrupamento médio (*average clustering coefficient*). (3) Almeja-se também realizar medidas de dinâmicas sobre essas redes a cada passo de remoção e analisar os perfis obtidos.

Referências:

1 COSTA, L. da F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; VILLAS BOAS, P. R. Characterization of complex networks: a survey of measurements, **Advances in Physics**, v.56, n.1,p. 167-242, 2007.DOI: 10.1080/00018730601170527. 2 SILVA, F. N.; CESAR, H.; COMIM, H.; COSTA, L. F. Malleability of complex networks. **Journal of Statistical Mechanics**: theory and experiment, v.2019, n. 8,p.083203,2019.DOI: 10.1088/1742-5468/ab2da1. 3 FAGIOLO, G. Clustering in complex directed networks. **Physical Review E**, v. 76, n. 2,p.026107, 2007.DOI: 10.1103/physreve.76.026107.

PG100

Fenômenos de transporte de única molécula através de um nanoporo em filme polimérico.

ZAGO, L. A. ; GUIMARAES, F. E. G.

leandro.zago@usp.br

A produção e a caracterização de nanoporos em membranas tem sido alvo de intenso estudo nas últimas décadas devido a extensiva gama de aplicações, desde a área biológica para estudos de transporte em membranas celulares(1), como na física para dispositivos eletrônicos. Este trabalho contempla a produção e a caracterização de nanoporos através do processo de litografia eletrônica em membranas de PMMA (Polimetilmetacrilato) de espessuras da ordem de micrometros, e o estudo dos fenômenos de transporte de uma única molécula através do nanoporo. Estas membranas ao serem utilizadas em um sistema eletrolítico possibilitam a produção de um dispositivo sensível a passagem de uma única molécula (2), pois a passagem da molécula através do nanoporo produz uma alteração na corrente eletrolítica estabelecida, deixando um sinal que é característico as propriedades elétricas e morfológicas da molécula de estudo. O estudo da formação dos nanoporos foi realizado variando algumas características do processo litográfico, como a formação de filmes com diferentes pesos moleculares, a exposição ao feixe eletrônico e o tempo de revelação. O formato do nanoporo é uma característica importante ao sistema (3), pois é possível obter respostas elétricas dependentes dessa característica, como seletividade de corrente e retificação.

Referências:

1 MOAZED, B; HASHEMI, M; ACHENBACH, S. Novel PMMA polymer-based nanopores capable of detection and discrimination between structurally different biomolecules. **IEEE Sensors Journal** , v.14, n.9, p.3292-3309, 2014. 2 TAN, S. *et al* . Detection of a single enzyme molecule based on a solid-state nanopore sensor. **Nanotechnology** , v.27, p.155502-155513, 2016. 3 PLETT, T. S. *et al* . Solid-state ionic diodes demonstrated in conical nanopores. **Journal of Physical Chemistry C** , v.121, p.6170-6176, 2017.

PG101

Fotobiomodulação como potencializadora da radioterapia: um estudo pré-clínico

FARIA, C. ; AVÓ, L. R. D. S. D. ; BAGNATO, V. S.

claramgf@ifsc.usp.br

Fotobiomodulação (PBM) consiste no uso de luz visível e infra vermelha para promoção de mudanças celulares e sistêmicas no metabolismo, proliferação, inflamação, entre outros. (1) Suas aplicações variam de cicatrização de feridas a analgesia, incluindo prevenção e redução de efeitos colaterais da radiação ao tecido normal. Nesse contexto, a aplicação mais significativa é para tratamento e prevenção de mucosite oral em pacientes de radioterapia. (2) Apesar disso, a comunidade médica é ainda relutante à incorporação dessa técnica por seus efeitos e mecanismos em tumores não ser bem conhecidos. No entanto, existem evidências de que a luz pode sensibilizar as células tumorais à radiação modulando seu metabolismo, ciclo celular e oxigenação. (3) Portanto, foi investigada a combinação da Fotobiomodulação e radiação em câncer de pele em modelos *in vitro* e *in vivo* para avaliação da segurança e benefícios da técnica em radioterapia. Os resultados com as células de carcinoma A431 mostraram que a PBM sozinha (5 J/cm², 780 nm, Mmoptics) não alterou a proliferação, mas aumentou a fração da população em G2/M, a fase do ciclo celular em que as células são mais sensíveis ao dano por radiação ionizante. Combinada a um protocolo fracionado de 3 x 0.8 Gy (XRAD 225x, Precision X-Ray), foi observada maior redução de células no ensaio clonogênico. Em modelo xenográfico desses tumores, em camundongos Balb-c nude, foram testados os protocolos de 3 x 5 Gy para o grupo radiação, 3 x (5 J/cm² - 24h - 5 Gy) para PBM-RT, 3 x 5 J/cm² para o grupo PBM group e iluminação *sham* para o controle (n=14). A análise de sobrevivência por Kaplan Meier foi realizada considerando morte um volume máximo tumoral de seis vezes o volume no início dos tratamentos, já que esse modelo não causa a morte do animal. Pelo teste de log-rank, observou-se aumento estatisticamente significativo na sobrevivência do grupo PBM-RT sobre o grupo RT, mas nenhuma diferença entre os grupos PBM e controle. Adicionalmente, as áreas necróticas foram monitoradas ao longo do experimento por tomografia de coerência óptica e, ao final, foi realizada uma análise histológica dos tumores. Assim, a fotobiomodulação no protocolo utilizado se mostrou segura para aplicação em células de câncer de pele e ainda potencialmente positiva para a radioterapia, aumentando a erradicação tumoral. Seus mecanismos e essa combinação precisam ser melhor estudados, já que é uma técnica de baixo custo, com protocolos simples e que já é utilizada clinicamente, com sucesso, para redução de efeitos adversos da radiação ionizante.

Referências:

1 FREITAS, L. F.; HAMBLIN, M. R. Proposed mechanisms of photobiomodulation or low-level light therapy. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v. 22, n. 3, p. 348–364, 2016
2 FEKRAZAD, R.; CHINIFORUSH, N. Oral mucositis prevention and management by therapeutic laser. **Lasers in Medical Science**, v. 5, n. 1, p. 1-7, 2014.
3 DJAVID, G. E.; BIGDELI, B.; GOLIAEI, B.; NIKOOFAR, A.; HAMBLIN, M. R. Photobiomodulation leads to enhanced radiosensitivity through induction of apoptosis and autophagy in human cervical cancer cells. **Journal of Biophotonics**, v. 10, n. 12, p. 1732, 2017

PG102

Optimization of temperature for 39 K: The Gray Molasses technique

BAGNATO, V. S. ; SALCEDO, E. G. I. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; CASTILHO, P. C. M. ; OLIVEIRA, G. A. D. ; MAZO, P. ; FARIAS, K. M.

vander@ifsc.usp.br

The goal of our global project is to produce a Bose-Einstein condensate of two species, Sodium and Potassium, with the possibility of varying the interspecies interaction for the study of aspects of superfluids in different regimes. Through the use of techniques such as stirring beam and Feshbach resonances it will be possible to study the vortex nucleation in a two species BEC with adjustable interactions, exploring the different miscibility regimes between the species, as well as formation and studies in quantum turbulence. But to achieve this regime, we need to implement different cooling techniques for both species. In this work, we show the application of the cooling technique known as Gray Molasses which was proposed by the references (1-2), with the objective of increasing the phase space density of our atomic cloud of 39 K. In this presentation, we will show how we get a temperature of approximately 10uK with $1.2E8$ atoms approximately, when we apply the Gray Molasses technique in a Magneto Optical Trap. In this way, we have a cold sample enough to join our second atomic species, Sodium, in order to proceed to the production of the mixture of atomic superfluids.

Referências:

- 1 SHAHRIAR, M. S. *et al* . Continuous polarization-gradient precooling-assisted velocity-selective coherent population trapping. **Physical Review A** , v. 48, n. 6, p. 4035–4038, 1993.
- 2 WEIDEMÜLLER, M. *et al* . A novel scheme for efficient cooling below the photon recoil limit. **EPL** (Europhysics Letters), v. 27, n. 2, p. 109, 1994.

PG103

Artificial neural networks and complex networks: an integrative study of topological properties and pattern recognition

SCABINI, L. ; BRUNO, O. M.

scabini@ifsc.usp.br

Artificial Neural Networks (ANNs) are in ascension, considering the modern society that increasingly demands better artificial intelligence techniques. The field had renewed attention, especially since 2012, due to the deep learning diffusion, where large and complex models are achieving impressive results. However, this also led to a blind search for better performance, and little is known regarding these network's internal functioning. (1) In parallel, the big data phenomenon and the growing capacity to collect data from several systems have made the Complex Network (CN) research to flourish. CN usually represents real-world phenomena composed of a wide range of elements and interactions, hard to analyze with simple approaches. These properties align with the actual context of ANNs, which consists of large amounts of neurons with signs of a complex topological organization. It is possible then to observe a high correlation between both areas (CNs and ANNs), which is still underexplored. Therefore, this correlation links the present research's proposed ideas, seeking to integrate both network science and neural networks for pattern recognition. The work has three main goals: 1) Analyze and describe the functioning of ANNs and its correlation between performance and topology. 2) Characterization of CNs with ANNs, analyzing how to transform graphs into new multidimensional representations as input for neural networks. 3) And the combination of CNs and ANNs into new integrative pattern recognition models, with the main focus on Computer Vision tasks. We achieved various preliminary results that already resulted in 4 publications, 2 submitted papers, and 4 others in production. On the first objective, a static visual analysis shows exciting results, where it is possible to observe distinct correlation patterns between ANN topology and performance. We are now addressing a dynamic approach and testing how to practically turn these properties into new neural network techniques such as construction, initialization, and training. Concerning the second objective, we propose a novel CN embedding based on vertex centrality, called deep topological feature maps (DTFM). This multidimensional representation is used with deep convolutional networks, achieving state-of-the-art results. As for the last objective, we proposed new computer vision methods approaching CNs and randomized neural networks, achieving exceptional performance in different applications such as texture analysis (2) and visual diagnosis of prostate cancer. (3)

Referências:

- 1 NGUYEN, A.; YOSINSKI, J.; CLUNE, J. Deep neural networks are easily fooled: high confidence predictions for unrecognizable images. *In* : IEEE CONFERENCE ON COMPUTER VISION AND PATTERN RECOGNITION, 2015, Boston. **Proceedings** [...] Boston: IEEE, 2015. p. 427–436.
- 2 SCABINI, L. F. S.; RIBAS, L. C.; BRUNO, O. M. Spatio-spectral networks for color-texture analysis. **Information Sciences** , v. 515, p. 64–79, 2020. DOI: 10.1016/j.ins.2019.11.042
- 3 RODRIGUES, V. C. *et al* . Electrochemical and optical detection and machine learning applied to images of genosensors for diagnosis of prostate cancer with the biomarker PCA3. **Talanta** , v. 222, p. 121444, 2020. DOI: 10.1016/j.talanta.2020.121444

PG104

Terapia fotodinâmica antimicrobiana da pneumonia bacteriana com nebulização e iluminação extracorpórea: eficiência da entrega e aspectos de segurança

KASSAB, G. ; TOVAR, J. S. D. ; BUZZÁ, H. H. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.
giulia.kassab@usp.br

Infecções do trato respiratório inferior são a principal causa de morte infecciosa no mundo. Diante da incidência cada vez mais frequente de resistência a antibióticos, e também do surgimento de novos patógenos, como vivemos atualmente com o SARS-CoV-2, se faz necessário o desenvolvimento de um tratamento para pneumonias que seja não só eficaz e seguro, mas também pluripotente. A terapia fotodinâmica antimicrobiana (TFDa) se apresenta como uma excelente opção, já que é capaz de eliminar vírus e bactérias de forma segura e sem selecionar resistência. Estudos anteriores já demonstraram a eficácia da combinação entre o fotossensibilizador indocianina verde (ICV) e a luz infravermelha na eliminação de bactérias causadoras de pneumonia *in vitro* e em modelo animal. (1-2) Este trabalho se propõe então a conjugar os melhores protocolos de entrega da ICV e da luz em estudos pré-clínicos, de forma que o projeto possa avançar para estudos clínicos de forma segura e otimizada. Demonstramos que a dose necessária para eliminar as bactérias *Streptococcus pneumoniae** e *Staphylococcus aureus** é segura em linhagens de macrófagos (J774), epitélio pulmonar (A549) e fibroblastos (L929). Em modelo animal (camundongos), a nebulização é capaz de entregar de maneira mais seletiva a dose de ICV semelhante à administrada por instilação intranasal. Foi possível propor um modelo para estimar a dose de luz necessária para obter-se o efeito fotodinâmico em animais. Finalmente, a segurança do tratamento de TFDa foi demonstrada no modelo animal, através da análise clínica e histologia dos órgãos de interesse.(3) De uma forma geral, a TFDa apresenta baixa toxicidade nos tecidos do hospedeiro e alta toxicidade nos patógenos, o que demonstra seu grande potencial no tratamento de infecções respiratórias.

Referências:

1 LEITE, I. S. *et al.* Near-infrared photodynamic inactivation of *S. pneumoniae* and its interaction with RAW 264.7 macrophages. **Journal of Biophotonics**, v.9, p.1–10,2017.DOI 10.1002/jbio.201600283. 2 GERALDE, M. C. *et al.* Pneumonia treatment by photodynamic therapy with extracorporeal illumination [U+2010] an experimental model. **Physiological Reports**, v.5,n.5, p.e13190, 2017. 3 KASSAB, G. *et al.* Safety and delivery efficiency of a photodynamic treatment of the lungs using indocyanine green and extracorporeal near infra[U+2010]red illumination. **Journal of Biophotonics**, v. 2020.p.1-13,2020.DOI 10.1002/jbio.202000176.

PG105

Resfriamento ótico ro-vibracional de um feixe supersônico de Rb2.

TORRES, M. L. ; MARCASSA, L. G.

lefran@ifsc.usp.br

O desenvolvimento de técnicas para resfriar e aprisionar moléculas diatômicas polares é motivado pelo amplo campo de suas potenciais aplicações. Entre as quais podemos citar as seguintes: controle de dinâmica molecular (1), espectroscopia de alta resolução e controle quântico (2) testes de leis fundamentais da física, informação e computação quântica (3), entre outras. Em nosso laboratório nós queremos desacelerar um feixe supersônico de moléculas diatômicas de Rubídio. As temperaturas vibracional e rotacional com as que as moléculas saem do forno, onde elas são formadas, foram estimadas a partir do espectro experimental das transições entre os estados moleculares $X^1 \sum_g^+(v_x, j_x) \rightarrow B^1 \Pi_u(v_B, j_B)$, obtendo temperaturas de 314 K e 75 K respectivamente. Isso evidencia que o feixe molecular está espalhado em vários níveis ro-vibracionais. Por tanto foi necessário desenvolver uma técnica para fazer o bombeamento ótico para o estado $X^1 \sum_g^+(v_x, j_x = 0)$. Nesta técnica utilizamos dois lasers de banda larga, um para fazer o resfriamento vibracional através do potencial 0_u^+ e outro para fazer o resfriamento rotacional através do potencial $B^1 \Pi_u$. O processo de resfriamento ro-vibracional com estes dois lasers banda larga foi simulado numericamente, mostrando que mais do 99 % das moléculas que saem do forno, espalhadas em vários níveis ro-vibracionais, são bombeadas para o estado $X^1 \sum_g^+(v_x = 0, j_x = 0)$ em aproximadamente 16 μ s, o que mostra que é possível fazer o bombeamento ótico com os sistemas de banda largas que temos neste momento. Simulações mostram que este esquema deve permitir a realização de desaceleração Zeeman de moléculas.

Referências:

1 GILLIJMSE, J. J. ;HOEKSTRA, S. ; MEERAKKER, S. Y. T.; GROENENBOOM, G. C.; MEIJER, G. Near-threshold inelastic collisions using molecular beams with a tunable velocity, **Science** v.313, n.5793,p.1617,2006. 2 KIM, J. T.; WANG, D.; EYLER, E. E. GOULD, P. L. ;STWALLEY, W. C.Spectroscopy of $39\text{K}85\text{Rb}$ triplet excited states using ultracold a $3+$ state molecules formed by photoassociation. **New Journal Physics** ,v. 11,n.5,p 055020, 2009. 3 DE MILLIE, D. Quantum computation with trapped polar molecules. **Physical Review Letters** ,v. 88, n.6,p.067901,2001.

PG106

On the laws of thermodynamics in the quantum regime

MALAVAZI, A. H. A. ; BRITO, F. B. D.

andrehamalavazi@ifsc.usp.br

Since its early stages, thermodynamics has been successfully verified in very different and extensive scenarios: its applicability ranges from very large physical systems to small single molecules. In the core of this undeniable success lies the famous laws of thermodynamics. More recently efforts are being made into the development of a consistent quantum thermodynamic theory able to describe the most broad scenario of nonequilibrium quantum systems. In this sense, it is interesting to notice that, just like its classical counterpart, this endeavor is fueled by both from practical and theoretical purposes. In one hand, recent progress on the manipulation, control and fabrication of quantum objects brings the requirement to understand the thermodynamics of such systems, on the other hand the comprehension of how the classical thermodynamic behavior emerge from more fundamental principles is imperative for a complete and continuous physical description of reality. However, despite its clear importance and many scientific efforts several subtle, but fundamental, issues are still open questions. It is not fully clear how to translate the usual thermodynamic notions, such as work, heat (1-2) and entropy production, to these general situations, or how to identify and take into account the role played by genuine quantum features in thermodynamic processes, such as entanglement and coherence. (3) In particular, these issues are critical to establish quantum versions of the laws of thermodynamics. In this project we are interested to address such questions. In this sense we expected to scrutinize different proposals of quantum heat and work, and investigate its consequences on the thermodynamics of different quantum dynamics. More specifically, in order to avoid approximations we are going to study an analytically solvable model (dephasing) to probe these quantities. By doing that it is expected to recognize possible candidates to such variables and identify coherent quantum versions of the laws of thermodynamics.

Referências:

1 ALICKI, R. The quantum open system as a model of the heat engine. **Journal of Physics A** : mathematical and general, v. 12, n. 5, p.L103, 1979. 2 TALKNER, P.; LUTZ, E.; HÄNGGI, P. Fluctuation theorems: work is not an observable. **Physical Review E** , v. 75, n. 5, p. 7–8, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevE.75.050102 3 SANTOS, J. P.; CÉLERI, L. C.; LANDI, G. T.; PATERNOSTRO, M. The role of quantum coherence in non-equilibrium entropy production. **Npj Quantum Information** , v. 5, n. 1, 2019. DOI: 10.1038/s41534-019-0138-y

PG107

Effect of deposition parameters on the gas sensing properties of $\text{In}_2\text{O}_3\text{-Sn}_2\text{O}_2$ (ITO) compound.

HERNANDEZ, L. E.

laureanoensuncho@usp.br

The use of metal oxide semiconductor materials applied as gas sensing devices is currently one of the most researched topic in air quality control and environmental protection. The research is aimed on the production of new sensing materials with improved sensor parameters such as detection limits, selectivity, working temperatures, and response times of the well-known semiconductor materials. For the most commonly used metal oxides as gas sensors a clear correlation between structure, size/morphology, and the gas sensing properties has not been experimentally established. (1) In this work, RF magnetron sputtering technique will be used to study the effect of deposition parameters on the gas sensing properties of $\text{In}_2\text{O}_3 - \text{SnO}_2$ (ITO) compound regarding different toxic gases. Preliminar results show that the deposition rate and the temperature of substrate during the deposition affect the morphology of the samples.

Referências:

1 KOROTCENKOV, G.; BRINZARI, V.; CHO, B. K. In_2O_3 -and SnO_2 -based ozone sensors: design and characterization. **Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences**, v. 43, n. 2, p. 83-132, 2018.

PG108

Nitrogen-Vacancy center in diamonds and its quantum applications.

ANDRADE, L.

lucas.nunes.andrade@usp.br

Nitrogen-Vacancy (NV) center is one of the several defects that can occur in the diamond lattice. It has been studied for the past few years because of its great applicability for quantum applications (1) (e.g quantum information) and magnetometry. (2) Due its spin properties, one can do an easy spin readout and change by optical means and use of microwaves, all this at room temperature. This allows the NV to perform as a sensor, once they are sensitive to magnetic and electrical fields. This work uses the Optically Detected Magnetic Resonance (ODMR) technique to measure longitudinal and transverse relaxation times. And explore the quantum applications of the NV as in quantum metrology applying quantum protocols. Moreover it will be shown the properties of the NV as a magnetic sensor and as a quantum thermometer.

Referências:

1 JELEZKO, F.; GAEBEL, T.; POPA, I.; DOMHAN, M.; GRUBER, A.; WRACHTRUP, J. Observation of coherent oscillation of a single nuclear spin and realization of a two-qubit conditional quantum gate. **Physical Review Letters** , v. 93, n. 13, p. 130501, 2004
2 ONCEBAY SEGURA, C. O. **Diamond studies for applications in quantum technologies** . 2019. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

PG109

Relations between the Ernst potentials and multipole moments in electrovacuum case

COSTA FILHO, E. da ; HARTMANN, B.

etevaldo.s.costa@usp.br

Multipole moments turn out to be really important since they permit the description of physical observable quantities of any type of sources in general relativity. These are useful to the study of compact bodies with an astrophysical meaning; for instance, black holes or neutron stars, as well as other interesting physical features related to them like geodesics, shadows, or lensing effects. Multipole moments for asymptotic static spacetimes have been earlier defined by Geroch. Later on, Geroch and Hansen extended this result to the stationary case. Several years ago, a complete description for multipole moments in stationary vacuum systems had been accomplished by Manko and Ruiz (1), where they were able to describe a mapping among the $4N$ -parameter stationary exact solution with the $4N$ arbitrary Geroch-Hansen multipole moments. This $4N$ exact solution is the vacuum specialization of the N -soliton electrovac solution derived in (2) via the Sibgatullin method (SM). (3) Recalling that SM provides a stationary exact solution in the entire spacetime once is settled any specific form of the Ernst potentials on the symmetry axis (the axis data). In this regard, the main idea of the paper (1) is quite clear; the multipole moments can be related to the parameters composing the axis data and vice-versa, therefore, the whole spacetime would be completely characterized with a whole physical meaning. Naturally, one might expect to extend this result to the electrovac scenario, which to our knowledge, has not been investigated yet. The present paper aims to give a concise general formulation for electrovac spacetimes in terms of multipole moments, extending the results provided earlier in. (1)

Referências:

1 MANKO, V. S.; Ruiz, E. Extended multi-soliton solutions of the Einstein field equations. **Classical and Quantum Gravity**, v. 15, n. 7, p. 2007, 1998. 2 RUIZ, E.; MANKO, V. S.; MARTÍN, J. Extended N -soliton solution of the Einstein-Maxwell equations. **Physical Review D**, v. 51, n. 8, p. 4192, 1995. 3 SIBGATULLIN, N. R. **Oscillations and waves in strong gravitational and electromagnetic fields**. Berlin: Springer-Verlag, 1991.

PG110

Triagem *in vitro* de derivados heterocíclicos em linhagens tumorais metastáticas não-responsivas ao tratamento

SOUZA, M. ; CAPRETZ-AGY, A. ; FERNANDES, F. S. ; RODRIGUES JUNIOR, M. T. ; COELHO, F. ; ANDRICOPULO, A. D.

msouza@ifsc.usp.br

Câncer é o termo genérico utilizado para designar um conjunto de doenças caracterizadas pela expansão autônoma e disseminação de um clone somático. Os quatro cânceres sólidos mais prevalentes são os que apresentam tumor maligno no pulmão, mama feminina (CM), intestino e próstata (CaP). Em conjunto, eles são responsáveis por mais de 4 a cada 10 diagnósticos. Segundo recente estimativa da incidência de câncer no Brasil, realizada pelo Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva, para os anos de 2020-22 haverá maior ocorrência de CM e CaP. (1) O CM é diverso em sua história natural e em sua capacidade de resposta aos tratamentos. A heterogeneidade acarreta diferentes perfis clínicos, histopatológicos e moleculares e, portanto, tornou-se viável classificá-lo em 5 subtipos. O subtipo basaloide, usualmente conhecido como câncer de mama triplo-negativo, é considerado na literatura como um “tumor atípico”. Ele representa 15 % de todos os casos de CM diagnosticados e é responsável por 30 % das mortes. Resultados de exames clássicos tais como mamografia e ultrassom são imprecisos nestas pacientes podendo até mesmo criar má interpretação de lesões com características benignas. Isto torna a detecção precoce da doença ser excepcionalmente difícil e a sobrevida global média das pacientes ser baixa, por volta de um ano e meio. Por não responder aos protocolos de tumor de mama com fenótipo molecularmente definido, as pacientes ainda vêm sendo submetidas às terapias citotóxicas tradicionais provenientes do reposicionamento de fármacos. Estudos revelam diversas ocorrências de recidivas dentro de cinco anos após o diagnóstico. O CaP, por sua vez, é o carcinoma não-cutâneo mais comum em homens no mundo todo. A sua classificação é realizada com base nos 6 estágios clínicos da doença. O último estágio é chamado de metastático resistente à castração (câncer de próstata hormônio refratário) e representa cerca de 35 % dos casos. A terapia de privação androgênica continua sendo um tratamento de primeira linha altamente eficaz. No entanto, a maioria dos pacientes tratados acaba desenvolvendo resistência e o quadro progride rapidamente apesar da supressão hormonal sistêmica em andamento, o que faz com que os pacientes tenham uma sobrevida mediana que varia de 12 a 27 meses. O presente trabalho traz os resultados do *screening* biológico para identificação de compostos mais seletivos com propriedades antitumorais. Séries de compostos heterocíclicos foram previamente avaliadas por meio da docagem molecular com o alvo tubulina. (2) As moléculas foram investigadas em ensaio *in vitro* frente às linhagens MDA-MB-231 e DU-145. Foram então selecionadas aquelas com $IC_{50} \leq 20 \mu M$ para ensaios em fibroblastos saudáveis de camundongo (FC3H) e humanos (HFF-1). Compostos que apresentassem índice de seletividade ≥ 10 , considerando simultaneamente as linhagens saudáveis – para pelo menos uma das respectivas linhagens tumorais – seriam escolhidos para ensaios migratórios. Apenas a amostra ACA-515, da classe das oxadiazolas, foi selecionada. (3) Os resultados até então possibilitaram a avaliação de 42 compostos com propriedades moleculares interessantes para candidatos a novos fármacos, mas, ainda, pouco seletivos. Os próximos passos envolvem modificações moleculares, novas sínteses e triagens.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **WHO report on cancer** : setting priorities, investing wisely and providing care for all. 2020. Disponível em: <https://apps.who.int/iris/handle/10665/330745>.

Acesso em: 30 ago. 2020 2 ČERMÁK, V.; DOSTÁL, V.; JELÍNEK, M.; LIBUSOVÁ, L.; KOVÁŘ, J.; RÖSEL, D.; BRÁBEK, J. Microtubule-targeting agents and their impact on cancer treatment. **European Journal of Cell Biology** , v. 99, n. 4, p. 151075, 2020. 3 CAPRETZ-AGY, A.; FERNANDES, F. S.; RODRIGUES JR, M. T.; CONTI, C.; COELHO, F. Aza-Morita–Baylis–Hillman reaction with vinyl-oxadiazoles: an expeditious approach to access new heterocyclic arrangements. **Synlett** , v. 31, n. 6, p. 622-626, 2020.

PG111

Estratégias em quimioinformática para uma série de compostos antichagásicos

MEDEIROS, A. ; ANDRICOPULO, A. D.

alex.medeiros@usp.br

A doença de Chagas é uma doença tropical negligenciada causada pelo *Trypanosoma cruzi* que afeta cerca de 6 a 7 milhões de pessoas em todo o mundo. (1) A doença é endêmica em 21 países da América Latina, mas também atinge a América do Norte, Europa, Ásia e Oceania. Os dois fármacos disponíveis para o tratamento da doença – benznidazol e nifurtimox – possuem alta toxicidade e baixa eficácia, principalmente na fase crônica da doença, o que demonstra a urgência da descoberta e desenvolvimento de novos fármacos. (2) A cruzaina, principal cisteína protease do *T. cruzi*, é essencial para o ciclo de vida do parasita e é um alvo molecular validado na busca por novos fármacos. (2) Este projeto tem como objetivo a otimização de uma série de inibidores da cruzaina através do uso de estratégias computacionais de química medicinal, incluindo estudos de relações quantitativas entre estrutura e atividade (QSAR). O conjunto de dados utilizado consiste em uma série de imidazóis planejados e avaliados no Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC), com valores de IC50 (concentração necessária para inibir 50% da atividade enzimática) determinados contra a cruzaina. (3) Estudos de Holograma QSAR (HQSAR) e AutoQSAR foram desenvolvidos para 36 análogos e modelos com alta consistência estatística interna e externa foram obtidos. O melhor modelo de HQSAR apresentou valores de $r^2 = 0,92$, $q^2 = 0,70$ e $r^2 \text{ pred} = 0,80$, utilizando os parâmetros átomos, ligações e conectividade para a derivação dos descritores moleculares. Por sua vez, modelos de AutoQSAR apresentando valores de $r^2 = 0,89$ e $q^2 = 0,90$ foram construídos usando impressões digitais do tipo dendríticas como descritores. Mapas de contribuição HQSAR identificaram os fragmentos moleculares que se correlacionam com a variação da atividade biológica dos inibidores. Estudos de QSAR tridimensional e docagem molecular complementarão os modelos bidimensionais já obtidos. Os modelos de QSAR gerados neste trabalho mostraram alta capacidade para prever a atividade de novas moléculas dentro da diversidade química estudada e, portanto, são úteis para orientar a otimização das propriedades do conjunto de dados explorado.

Referências:

- 1 DRUGS FOR NEGLECTED DISEASES INITIATIVE (DNDi). **Doença de Chagas**. Disponível em: <https://www.dndial.org/doencas/doenca-chagas/>. Acesso em: 27 set. 2020. •
- 2 FERREIRA, L. G.; ANDRICOPULO, A. D. Targeting cysteine proteases in trypanosomatid disease drug discovery. **Pharmacology Therapeutics**, v. 180, p. 49–61, 2017. DOI: 10.1016/j.pharmthera.2017.06.04
- 3 SOUZA, M. L.; REZENDE JUNIOR, C. O.; FERREIRA, R. S.; ESPINOZA CHÁVEZ, R. M.; FERREIRA, L. L. G.; SLAFER, B. W.; MAGALHÃES, L. G.; KROGH, R.; OLIVA, G.; CRUZ, F. C.; DIAS, L. C.; ANDRICOPULO, A. D. Discovery of potent, reversible, and competitive cruzain inhibitors with trypanocidal activity: a structure-based drug design approach. **Journal of Chemical Information and Modeling**, v. 60, n. 2, p. 1028-1041, 2020.

PG112

O princípio de incerteza energia-tempo a partir de relações entrópicas

RODRIGUES, N. E. ; SOARES-PINTO, D. O.

naruna@usp.br

Um dos alicerces da mecânica quântica está no princípio de incerteza de Heisenberg, o qual diz que a posição e o momento de uma partícula quântica não podem ser medidos simultaneamente com uma precisão infinita. (1) Sendo assim, esse princípio foi formulado em termos dos desvios padrões da posição e do momento. Porém, ao longo dos anos esse princípio foi se expandido para outros observáveis quânticos, entre eles a incerteza energia e tempo. A partir disso, desencadeou-se a seguinte discussão: seria o tempo um parâmetro ou um observável? Tal questionamento foi feito por grandes físicos da época, dentre eles estão Bohr, Schroedinger e Pauli. Hoje, trata-se o tempo apenas como um parâmetro na mecânica quântica. (2) Além disso, notou-se que os desvios padrões não eram os melhores quantificadores para a incerteza, uma vez que eles dependem dos rótulos uma vez que se alteram ao ganhar informação sobre os “eventos” do sistema. (3) Por outro lado, ao se utilizar entropia como medida da incerteza, tem-se uma invariância em relação dos rótulos designados aos eventos. Uma vez que as relações entrópicas dependem apenas das distribuições de probabilidade dos eventos que compõe o sistema. Em virtude disso, surge o tema de pesquisa aqui abordado: como retratar o princípio de incerteza energia-tempo a partir de relações entrópicas.

Referências:

- 1 DEFFNER, S.; CAMPBELL, S. Quantum speed limits: from Heisenberg's uncertainty principle to optimal quantum control. **Journal of Physics A** , v. 50, n. 45, p. 453001-1-453001-49, 2017.
- 2 COLES, J. P. *et al* . Entropic uncertainty relations and their applications. **Reviews of Modern Physics** , v. 89, n. 1, p. 015002-1-015002-58, 2017.
- 3 COLES, J. P. *et al* . Entropic energy-time uncertainty relation. **Physical Review Letters** , v. 122, n. 10, p. 100401-1-100401-6, 2019.

PG113

Estudo da glicosiltransferase LafB de *Enterococcus faecium* envolvida na supersensibilidade a daptomicina

ESQUÊN, P. I. H. ; MUNIZ, J. R. C. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.

pamelahuanambal@usp.br

Nas últimas décadas, as bactérias resistentes a múltiplos fármacos (MDR) se tornaram um problema importante de saúde pública em todo o mundo. A fim de promover a pesquisa e o desenvolvimento de novos antibióticos, a Organização Mundial da Saúde classificou um grupo de bactérias MDR quanto à prioridade, entre as quais se encontra *Enterococcus faecium*, classificado como microrganismo de alta prioridade para a busca de novos fármacos. (1) Entre as opções terapêuticas de último recurso para combater infecções causadas por *Enterococcus spp.* está a daptomicina, no entanto, a resistência desses microrganismos a este antibiótico já foi relatada. Recentemente, nosso grupo detectou que uma mutação no gene *lafB*, que codifica a glicosiltransferase LafB, de *E. faecium* causou hipersensibilidade à daptomicina. (2) LafB é uma proteína envolvida na via de formação da âncora do ácido lipoteicoico (LTA), que também está presente em outras bactérias gram-positivas como *Listeria monocytogenes* e *Enterococcus faecalis*. (3) Deste modo, este trabalho procura verificar o papel da mutação do gene *lafB* no fenótipo bacteriano e caracterizar biofísicamente a proteína LafB, pois é um alvo promissor para aumentar a atividade da daptomicina em bactérias gram-positivas. Para este fim, será realizada a clonagem, expressão e purificação da proteína LafB normal e mutante, a qual será estudada utilizando difratação circular, ensaios dinâmicos de dispersão de luz e fluorescência de varredura diferencial. Para a caracterização fenotípica, cepas normais e mutantes serão expostas a várias condições fenotípicas usando *Omnilog Phenotypic Microarray Technology* bem como será avaliada a fluidez da membrana e a formação quantitativa do biofilme.

Referências:

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Prioritization of pathogens to guide discovery, research and development of new antibiotics for drug-resistant bacterial infections, including tuberculosis**. Genebra: WHO, 2017. 87 p. Disponível em: https://www.who.int/medicines/areas/rational_use/PPLreport_2017_09_19.pdf?ua=1. Acesso em: 02 out. 2020.
- 2 MELLO, S. S. *et al*. A mutation in the glycosyltransferase gene *lafB* causes daptomycin hypersusceptibility in *Enterococcus faecium*. **Journal of Antimicrobial Chemotherapy**, v. 75, n. 1, p. 36-45, 2020.
- 3 REICHMANN, N. T.; GRÜNDLING, A. Location, synthesis and function of glycolipids and polyglycerolphosphate lipoteichoic acid in gram-positive bacteria of the phylum firmicutes. **FEMS Microbiology Letters**, v. 319, n. 2, p. 97-105, 2011.

PG114

Disorder-driven delocalization of collective modes in the Bose-Hubbard model

GETELINA, J. ; HOYOS, J.

getelina@ifsc.usp.br

Recent experimental developments in ultracold atoms trapped in optical lattices (1) have inspired the pursue of analytical solutions to the Bose-Hubbard (BH) model. One such solution proposes a mean-field ground state for the system in a truncated Hilbert space (2), which is justified in the limit of large integer fillings. This solution is able to capture both the Mott and superfluid phases of the BH model. To analyze excitations on top of the mean-field ground state, Gaussian fluctuations are introduced. Up to quadratic order, the resulting Hamiltonian for the collective excitations becomes noninteracting. Based on this mean-field approach, a recent study of the two-dimensional (2D) BH model in a lattice with random site dilution has shown the existence of extended (delocalized) collective modes within the superfluid phase. (3) This result is rather intriguing since, according to the Anderson theory of localization, extended states cannot occur for noninteracting disordered systems in 2D. However, the current interpretation is that the mean-field solution introduces nontrivial correlations at the resulting Hamiltonian, which in principle could allow for extended states. In this work we investigate whether the existence of delocalized collective modes in the 2D random BH model is universal, i.e., independent of how disorder is introduced in the system. Instead of looking to a lattice with random site dilution, we introduce the onsite energies as realizations of a random variable. We show that the phase diagram shifts towards the opposite direction of the case with site dilution. Regarding the localization properties, we verify the same behavior: only the lowest-energy excitation Goldstone mode becomes delocalized within the superfluid phase; for the Higgs mode, any excitation remains localized.

Referências:

1 ORZEL, C.; TUCHMAN, A. K.; FENSELAU, M. L.; YASUDA, M.; KASEVICH, M. A. Squeezed states in a Bose-Einstein condensate. **Science**, v. 291, n. 5512, p. 2386-2389, 2001. 2 ALTMAN, E.; AUERBACH, A. Oscillating superfluidity of bosons in optical lattices. **Physical Review Letters**, v. 89, n. 25, p. 250404-1-250404-4, 2002. 3 PUSCHMANN, M.; CREWSE, J.; HOYOS, J. A.; VOJTA, T. Collective modes at a disordered quantum phase transition. **Physical Review Letters**, v. 125, n. 2, p. 027002-1-027002-6, 2020.

PG115

Is it better to increase the analytical signal or the surface area for ultrasensitive detection of cancer biomarkers using immunosensors based on screen-printed electrodes and NiFe₂O₂ nanoparticles?

REDIN, G. G. I. ; GONÇALVES, D.

gipi1908@gmail.com

Electrochemical immunosensors made with screen-printed electrodes (SPE) are suitable for disposable, inexpensive and easy to handle analytical tests to detect cancer biomarkers in point-of-care applications. (1) A variety of materials can be used to modify the working electrode in these devices in order to improve analytical features and provide functional groups for attaching biomolecules. (2) These modifications should be conceived to meet the stringent requirements of increased surface areas for immobilizing a large amount of biomolecules and enhancements of analytical signals, which sometimes represent opposing performance factors. (3) In biosensors containing nanoparticles (NPs), for instance, a large concentration of NPs provides more sites for biomolecule immobilization, but this can also lead to agglomeration and reduction of catalytic activity, thus decreasing the analytical signal. Despite the great attention attracted by electrochemical immunosensors based on SPEs in the last years, there is a lack of information on how these factors affect the overall behavior of the devices. Herein, we developed electrochemical immunosensors to detect the cancer biomarker p53 using electrodes modified with films of polyethyleneimine (PEI) and mesoporous NiFe₂O₂ nanoparticles. The high surface area of NiFe₂O₄ NPs was combined with the use of PEI films, which facilitated the electron transfer at the electrode interface and contributed to higher analytical signals. The effect of varying the concentration of NPs on physical, electrochemical, and analytical properties of the immunosensors was investigated using different techniques: scanning electron microscopy, quartz crystal microbalance, electrochemical impedance spectroscopy and polarization-modulation infrared reflection absorption spectroscopy. We verified that despite presenting a lower analytical signal, immunosensors with a higher concentration of nanoparticles exhibited a remarkable sensing performance, which can be attributed to a higher loading capacity for antibodies immobilization. Under optimized conditions, the device showed a low limit of detection of 5 fg mL⁻¹ within a wide dynamic range (from 1.0 to 10³ pg mL⁻¹). Also, the immunosensors showed an excellent selectivity toward p53 detection as demonstrated in assays using complex matrices (i.e., fetal bovine serum, saliva, and cell lysate), which contain proteins and other possible interferents.

Referências:

1 ARDUINI, F. *et al.* Electrochemical biosensors based on nanomodified screen-printed electrodes: recent applications in clinical analysis. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 79, p. 114-126, May 2016. 2 AHMAD, R. *et al.* Deposition of nanomaterials: a crucial step in biosensor fabrication. **Materials Today Communications**, v. 17, p. 289-321, Dec. 2018. 3 SOARES, J. C. *et al.* Supramolecular control in nanostructured film architectures for detecting breast cancer. **ACS Applied Materials and Interfaces**, v. 7, n. 22, p. 11833-11841, May 2015.

PG116

Molecular dynamic simulations of drug interactions with membrane models

ZAPATA, J. C. B. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; MOURA, A. F. D.

juan.burbano@ifsc.usp.br

Levofloxacin is a broad spectrum antibiotic used to fight infections in the respiratory system, whose action in topical administrations (via inhalation) depends on molecular-level interactions with the alveolar membrane. In this work, we performed a molecular dynamics (MD) simulation to analyze the behavior of levofloxacin with a Langmuir-monolayer model using hydrated dipalmitoyl phosphocholine (DPPC) lipid as the main component of lung surfactant. The zwitterionic levofloxacin (1) (with stable form in the pH range of 6.0-7.5) was calibrated in the coarse-grained (CG) Martini force field (2) to reproduce free energies of solvation and the partition coefficient at the water-octanol interface. The CG bonded parameters were adjusted and compared with atomistic simulations to optimize the topology. The interaction of levofloxacin (2% w/w) with a 512-DPPC CG monolayer shows an increase in pressure for the phase transition in surface pressure-area isotherms, which is also observed experimentally. (3) The location of Levofloxacin induces a dipolar rearrangement of the phospholipid DPPC headgroup, favoring aggregation after the phase transition and drastically reducing its diffusion. These findings provide insights into efficient ways for topical medication with this drug.

Referências:

1 LAMBERT, A.; REGNOUF-DE-VAINS, J.-B.; RUIZ-LÓPEZ, M. Structure of levofloxacin in hydrophilic and hydrophobic media: Relationship to its antibacterial properties. **Chemical Physics Letters** , v. 442, n. 4-6, p. 281-284, July 2007. 2 MARRINK, S. J. *et al.* The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations. **Journal of Physics Chemistry B** , v. 111, n. 27, p. 7812-7824, July 2007. 3 ORTIZ-COLLAZOS, S. *et al.* . Interaction of levofloxacin with lung surfactant at the air-water interface. **Colloids and Surfaces B** , v. 158, p. 689-696, Oct. 2017.

PG117

Descoberta e desenvolvimento de candidatos antivirais contra o vírus da febre amarela baseados na estrutura do complexo NS2B-NS3 protease

NOSKE, G. D. ; OLIVA, G. ; GODOY, A. S. D. ; OLIVEIRA, V. G. F.

O vírus da febre amarela tem genoma composto por uma única fita de RNA e pertence ao gênero flavivírus, que inclui dengue, zika e hepatite C. Apesar do histórico da doença, ainda não existe nenhum medicamento para seu tratamento. No Brasil, a doença se mantinha contida com a vacinação, no entanto, um surto recente no início de 2017, recolocou a febre amarela como preocupação de saúde pública, com risco de espalhar-se novamente no ambiente urbano. (1) O genoma viral codifica uma única poli proteína que contém três proteínas estruturais e sete não estruturais. A NS3 tem dois domínios: um domínio protease e um domínio helicase/NTP-ase. A NS3 protease age juntamente com uma outra proteína não estrutural como cofator, a NS2B, que auxilia o enovelamento correto da NS3 protease e permite que tenha uma forma ativa. O complexo NS2B-NS3 protease cliva a poliproteína imatura, liberando as proteínas formadoras do complexo de replicação viral. (2) Considerando a importância deste complexo no ciclo de replicação viral, é evidente que ele representa um importante alvo no planejamento de potenciais candidatos antivirais. Sendo assim, o objetivo deste projeto consiste em realizar a expressão e purificação da enzima NS2B-NS3pro e otimização das condições de cristalização para determinação de sua estrutura cristalográfica e posteriormente utiliza-la na busca por ligantes aliada a ensaios de atividade para obtenção de um potencial candidato a antiviral. Até o momento, a expressão, purificação e cristalização da enzima foi realizada com sucesso, sendo possível resolver a estrutura da enzima pelo método de substituição molecular, obtendo um modelo final em 2.9 Å de resolução. Ainda neste período, foram realizadas mutações sítio-dirigidas para obtenção da linhagem antecessora da circulante no Brasil em 2017, seguidas de sua expressão, purificação e caracterização. Adicionalmente, foi realizada a clonagem, padronização da expressão e purificação de nova construção da enzima (NS2B-NS3pro unlinked) que baseada nas estruturas depositadas no PDB para ZIKV aparenta ser promissora na obtenção de cristais que difratem em alta resolução para futura obtenção de complexos com ligantes. Nos passos seguintes, pretendemos realizar um screening de ligantes utilizando o ensaio de atividade já padronizado, com intuito de encontrar um candidato a inibidor da enzima a ser utilizado para obtenção de um complexo deste com a NS2B-NS3pro e utilizar o método de SBDD para sua otimização, para isto, serão utilizadas ambas as construções. Os ligantes mais promissores terão inibição testada em células contendo o replicon de YFV.

Referências:

1 GÓMEZ, M. M. *et al* . Genomic and structural features of the yellow fever virus from the 2016-2017 Brazilian outbreak. **Journal of General Virology** , v. 99, n. 4, p. 536–548, 2018. 2 PHOO, W. W. *et al* . Structure of the NS2B-NS3 protease from Zika virus after self-cleavage. **Nature Communications** , v. 7, p. 13410, 2016.DOI: 10.1038/ncomms13410

PG118

Avaliação da atividade de inibidores sintéticos em glutaminases

RODRIGUES, C. T. ; DIAS, S. M. G. ; AMBROSIO, A.

camila.tanimoto.rodrigues@usp.br

Devido a proliferação celular descontrolada, células tumorais apresentam maior demanda energética e biossintética. Uma adaptação metabólica característica dessas células é a preferência pela via glicolítica, mesmo na presença de oxigênio. Essas adaptações acarretam no aumento de consumo de glutamina, convertida em glutamato pela enzima glutaminase para ser posteriormente metabolizado e alimentar a síntese de aminoácidos e lipídeos. Três diferentes tipos de glutaminases foram identificadas em mamíferos, sendo a glutaminase C (GAC) apontada como fundamental e tendo sido identificada em abundância em diferentes tipos de células tumorais. (1) Dessa forma, a GAC se mostra como uma forte candidata a alvo molecular em tratamentos terapêuticos de tumores. Adicionalmente, estudos prévios apontam indícios de que a atividade enzimática da GAC estar correlacionada com a formação de estruturas de filamentos de seus tetrâmeros. (2) Neste contexto, o objetivo deste projeto é a avaliação do efeito de diferentes inibidores na atividade enzimática da GAC. A proteína foi obtida através da expressão em larga escala em sistema bacteriano e purificação por diferentes cromatografias (afinidade, troca iônica e exclusão molecular) a fim de se obter um alto grau de pureza. Para avaliar a atividade da GAC e os efeitos de inibidores foram realizados ensaios de atividade, curvas de dose-resposta, análise do estado oligomérico através de Dynamic Light Scattering (DLS) e análise da estabilidade estrutural através de ensaios de thermal shift por Differential Scanning Fluorimetry (DSF). Como controles positivo e negativo de atividade foram utilizadas condições padrão na presença e ausência de fosfato inorgânico, que atua como ativador. Como controle de inibição, foi utilizada a condição na presença do inibidor padrão previamente caracterizado BPTES. (2) O inibidor BPTES acentuadamente inibe a atividade enzimática da GAC e rompe os filamentos em tetrâmeros, como observado através dos ensaios de DLS. Diferentes classes de compostos foram triados a partir de ensaios de atividade até a última classe a ser caracterizada.

Referências:

1 CASSAGO, A. *et al* . Mitochondrial localization and structure-based phosphate activation mechanism of Glutaminase C with implications for cancer metabolism. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America** v. 109, n. 4, p. 1092–1097, 2012. 2 FERREIRA, A. P. S. *et al* . Active glutaminase C self-assembles into a supratetrameric oligomer that can be disrupted by an allosteric inhibitor. **Journal of Biological Chemistry** , v. 288, n. 39, p. 28009–28020, 2013.

PG119

Análise da influência de elementos de transposição do clado CR1 na arquitetura do genoma do *Schistosoma mansoni*

CHEROBIN, E. ; MARCO, R. D.

eduardo.cherobin.martins@usp.br

Schistosoma mansoni é um platelminto parasitário, sendo um dos principais agente etiológicos da esquistossomose em humanos. A esquistossomose constitui hoje um grave problema de saúde pública em vários países tropicais. A doença foi reportada em 78 países e pode ser considerada endêmica em 52 deles. Em 2012, pelo menos 249 milhões de pessoas estavam em regiões endêmicas, para as quais era recomendado o emprego de tratamento preventivo. Dezenas de retrotransposons já foram descritos no genoma do *S. mansoni*, sendo os transposons do tipo não-LTR os elementos móveis mais abundantes, representando 15% do genoma. Elementos do tipo não-LTR no genoma do *S. mansoni* podem ser atribuídos aos clados CR1, R2 e RTE. Já foi previamente demonstrado que o parasito humano *Schistosoma mansoni* possui uma alta taxa transcripcional de elementos de transposição e se observam expansões recentes no número destes elementos no genoma do parasito, destacando a importância destes elementos na estruturação recente deste genoma. Portanto, um maior entendimento da distribuição de elementos transponíveis no genoma do *S. mansoni* permitirá obter maiores informações sobre o papel de elementos de transposição na evolução de genomas deste ramo evolutivo. Verificamos que todos os transposons do tipo não-LTR do clado CR1 possuem tendência significativamente maior do que esperada ao acaso de se inserirem em regiões intergênicas e de forma colinear a genes que se encontram na vizinhança da inserção, sugerindo mecanismos de reconhecimento de genes durante o processo de inserção do elemento. Tal tendência não é verificada em transposons do clado RTE, sugerindo que trata-se de característica relacionada especificamente a transposons do clado CR1. Além disso, os elementos pertencentes ao clado CR1 que codificam para proteínas contendo um domínio PHD apresentam uma grande proporção dos elementos que se inserem a pequena distância do sítio de início de transcrição do gene, o que não é observado em transposons sem este domínio. Dados anteriores indicam que domínios PHD interagem com histonas com modificação H3K4me3 e que tais tipos de histona são frequentes em regiões de promoção de transcrição. Considerando estes dados sugerimos um mecanismo no qual a incorporação do domínio PHD em transposons do clado CR1 permitiu o direcionamento a esta região adjacente ao sítio de transcrição através da interação direta deste domínio com as histonas modificadas.(1)

Referências:

1 VENANCIO, T. M. *et al* . Bursts of transposition from non-long terminal repeat retrotransposon families of the RTE clade in *Schistosoma mansoni*. **International Journal for Parasitology** , v. 40, n. 6, p. 743-749, 2010.

PG120

Abordagem NRG para o cálculo do coeficiente de adsorção em átomos colidindo em uma superfície metálica.

DINIZ, G. ; OLIVEIRA, L. N. D.

gustavodiniz0310@usp.br

A adsorção de partículas atômicas em superfícies metálicas é um processo de grande importância, tanto para estudos teóricos, como para aplicações práticas. A catálise e corrosão são dois temas que sobressaem nesse contexto. Ambos os fenômenos podem ser entendidos a partir do processo de colisão entre um átomo ou molécula e uma superfície. Qualitativamente, o problema pode ser descrito por: uma partícula, inicialmente neutra, se aproxima da superfície metálica. A superposição entre os orbitais da partícula e os dos átomos na superfície cresce e possibilita transferência de carga do átomo para superfície. Quando um elétron é transferido, a partícula passa a ter carga elétrica, e aparece um potencial de carga imagem, que acelera a partícula. Na colisão subsequente, a geração de fônons e de pares elétron-buraco no metal rouba energia da partícula incidente, que pode ficar presa no potencial atrativo. Existe, portanto, uma probabilidade de que a partícula acabe adsorvida pela superfície. O desafio teórico é calcular essa probabilidade, que recebe o nome de coeficiente de adsorção S . O cálculo da contribuição dos pares elétron-buraco para S , em função da energia cinética inicial, é uma questão ainda aberta e constituirá o foco deste trabalho. Trabalharemos com um modelo simples para representar a incidência normal de um átomo de hidrogênio, inicialmente neutro, sobre a superfície de um metal simples, que será descrito por uma banda de condução sem estrutura. Em trabalhos anteriores, foi mostrado que a aproximação de Born-Oppenheimer, tradicionalmente empregada, é pouco confiável, e que um cálculo completo, empregando tratamento numérico preciso da função de onda dependente do tempo é necessário. (1) Esse trabalho, entretanto, tem precisão limitada porque recorreu a uma aproximação de campo médio para descrever a interação entre o átomo e os elétrons da banda. Queremos aqui aperfeiçoar o cálculo. Para isso, substituiremos a aproximação de campo médio por meio do método do grupo de renormalização numérico (NRG), que produz resultados essencialmente exatos. (2) Para descrever o sistema de interesse, empregaremos o modelo de Anderson de uma impureza (3), cujo Hamiltoniano tem a seguinte forma, em notação padrão: $H = \sum_{\sigma} \varepsilon_d c_d^{\dagger} c_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_k \varepsilon_k c_k^{\dagger} c_k + V(z)(f_0^{\dagger} c_d + c_d^{\dagger} f_0) + \frac{P_z^2}{2M} + W(z)(n_d - 1)^2 f_0^{\dagger} f_0$. Onde os três primeiros termos são os tradicionais termos do modelo de Anderson (c_d denota o orbital atômico, $f_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k$, N é o número de estados c_k da banda de condução). O penúltimo termo é a energia cinética do núcleo e o último termo é o potencial da carga imagem. Para cada valor da coordenada $z = z_m$, o espectro de energias eletrônicas é calculado pelo NRG. No estado inicial, a partícula está longe da superfície, e sua função de onda é o produto entre o estado fundamental eletrônico e uma gaussiana centrada numa posição inicial, a qual descreve a parte nuclear. O procedimento de Crank-Nicolson permite calcular a evolução temporal da função de onda, até que, depois da colisão, a função se divida em uma parte localizada perto da superfície e outra que se afasta dela. A integral espacial do módulo quadrado da primeira parte determina o coeficiente de adesão S .

Referências:

1 REGO, C. R.; REQUIST, R.; GROSS, E. K. U.; OLIVEIRA, L. N. **Sticking coefficient for atoms scattering off metallic surfaces**. (No prelo) 2 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 80,

n. 2, p. 395, 2008. 3 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. **Physical Review** ,
v. 124, n. 1, p. 41, 1961.

PG121

Nuvens-Q carregadas ao redor de buracos negros esfericamente simétricos e estáticos

CONSOLE, F. ; HARTMANN, B.

felipe.console@usp.br

A Teoria da Relatividade Geral (TRG) é a teoria da gravidade desenvolvida e finalizada por Einstein em 1915. Desde então, suas previsões são confirmadas por todos os experimentos e observações já realizados. Em especial, os testes no sistema solar (por exemplo, os testes clássicos do avanço do periélio de Mercúrio, a deflexão da luz e o desvio para o vermelho gravitacional) onde os desvios da gravidade Newtoniana é pequeno, foram cruciais para firmar a TRG como uma teoria fundamental da Física no século XX. (1) No entanto, para testar a TRG em regimes onde o campo gravitacional é forte, precisamos ir além do sistema solar. A detecção de ondas gravitacionais por meio de observatórios baseados na Terra permite testar a TRG em regimes de gravidade forte. Em especial, permite testar uma previsão da TRG sobre buracos negros, a saber: a ausência de *cabelos* nas soluções do tipo buracos negros. Isto é, a TRG diz que as soluções da Equação de Einstein-Maxwell que descrevem buracos negros, com as hipóteses de um espaço-tempo assintoticamente plano e estacionário, é totalmente caracterizada por três parâmetros: a massa, o momento angular e a carga elétrica do buraco negro. No nosso projeto, procuramos entender soluções do tipo buraco negro na presença de campos escalares complexos minimamente acoplados ao campo eletromagnético e com auto-interações. Nosso interesse recai em soluções onde o campo escalar é não-trivial, podendo introduzir um *cabelo escalar*, isto é, um parâmetro adicional na descrição do espaço-tempo no exterior do buraco negro. Dada a alta não-linearidade das equações do modelo, recorreremos à solução numérica das equações.(2)

Referências:

1 WILL, C. M. **Theory and experiment in gravitational physics** . 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2018. 2 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B. **Strong gravity effects of charged Q-clouds and inflating black holes**. 2020. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/2009.08293.pdf>. Acesso em: 02 out. 2020.

PG122

Expressão, purificação e busca de ligantes inibidores da proteína PLpro do vírus SARS-CoV-2

FREIRE, M. C. L. C. ; NOSKE, G. D. ; OLIVEIRA, V. G. F. ; NAKAMURA, A. ; GODOY, A. S. D. ; OLIVA, G.

marjorie_freire_@hotmail.com

Devido ao cenário atual da pandemia da doença COVID-19, foi mobilizada uma força-tarefa com os membros do nosso laboratório para o projeto “Desenvolvimento de Antivirais contra a COVID-19”. Dessa forma, este resumo refere-se a alguns resultados obtidos dos esforços realizados para esse fim, sem prejuízo ao meu projeto principal de doutorado com proteínas do vírus Chikungunya, o qual será apresentado no próximo SIFISC. O surto de COVID-19 emergiu em Dezembro de 2019 em Wuhan (China) e rapidamente se disseminou em escala global, afetando a economia e os sistemas de saúde de todo o mundo. (1) O agente causador desta atual pandemia é o SARS-CoV-2, vírus envelopado pertencente à família Coronaviridae e que possui material genético do tipo ssRNA(+). O seu genoma é capaz de codificar 4 proteínas estruturais e 16 proteínas não estruturais que são responsáveis pelos mecanismos de infecção e de replicação viral, respectivamente. (2) Apesar dos inúmeros esforços que vem sendo realizados, até o momento ainda não há vacinas licenciadas disponíveis para a população ou tratamentos antivirais específicos. Neste contexto, uma das proteínas não estruturais deste vírus, a protease Papain-like (PLpro), também conhecida como nsp3, é uma enzima que participa do processamento da poliproteína viral, apresentando um papel relevante na replicação do vírus. (2) Por essa razão, a PLpro surge como um interessante alvo para a busca de moléculas inibidoras, visando o desenvolvimento de candidatos antivirais capazes de inibir de forma específica esta protease, gerando a interrupção da replicação do vírus e a sua consequente propagação. Para isso, o gene codificante para a PLpro foi obtido, clonado em vetor de expressão pET-28 e expresso através do sistema heterólogo bacteriano (*E. coli*). Em seguida, a proteína foi purificada através de métodos cromatográficos e a pureza foi verificada em todas as etapas do processo utilizando eletroforese em gel de acrilamida SDS-PAGE. Ensaio de atividade enzimática foram realizados com o substrato específico para verificar se a enzima purificada era ativa, bem como também foi mensurado o seu perfil de atividade em diferentes condições tamponantes, a fim de otimizar as condições do ensaio. Com o ensaio padronizado, experimentos de inibição da atividade enzimática foram realizados na presença de compostos e peptídeos inibidores. Ensaio de dose resposta foram realizados em seguida apenas para os que apresentaram inibição da PLpro. Os resultados iniciais mostraram que alguns peptídeos avaliados foram capazes de inibir a atividade enzimática, incluindo uma inibição com baixa concentração inibitória na escala de nanomolar. Como perspectivas, estudos celulares complementares serão realizados para aprofundar o estudo referente a essa inibição obtida. Além disso, mais compostos e pequenas moléculas também serão testados para a busca de mais candidatos a inibição da PLpro.

Referências:

- 1 GUO, Y. R. *et al* . The origin, transmission and clinical therapies on coronavirus disease 2019 (COVID-19) outbreak- an update on the status. **Military Medical Research** , v. 7, n. 1, p. 1–10, 2020.
- 2 DÖMLING, A.; GAO, L. Chemistry and biology of SARS-CoV-2. **Chem** , v. 6, n. 6, p. 1283, 2020.

PG123

Estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido a quebra da invariância de Lorentz

CASTILHO, R. R. ; HUERTA, H. M.

rafael.rodrigues.castilho@usp.br

Observatórios modernos nos permitiram avanços no estudo da astrofísica de partículas, devido a suas grandes precisões nas medidas e a possibilidade de estudar um grande número de fontes e de eventos. Graças a tais avanços hoje é possível utilizar a astrofísica de partículas para testar física fundamental e seus limites de validade. Alguns estudos recentes dedicados a procura de teorias unificadoras, como, por exemplo teorias quânticas da gravidade, são compatíveis com a quebra da invariância de Lorentz(LV), embora os sinais de LV são esperados para serem pequenos e ocorrem em altas energias, nós podemos utilizar da astrofísica de partículas para determinar limites de validade dado as altíssimas energias e grandes distâncias envolvidas. Uma das técnicas mais comuns na astrofísica de partículas é o estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido à quebra da invariância de Lorentz (1), neste regime, fótons com altas energias possuem velocidades diferentes devido a modificações na relação de dispersão do fóton e assim devem chegar à Terra em tempos diferentes. Neste projeto realizamos um estudo do tempo de atraso de fótons em função da energia devido a LV no Modelo Padrão Estendido(2), levaremos em conta em nossa análise efeitos que possam enviesar nosso estudo como atrasos intrínsecos na fonte e atenuação na energia dos raios gama devido a interações com a radiação de fundo para que possamos de forma correta modelar um conjunto de dados experimentais de *Gamma Ray Bursts*(3) e determinaremos se este dado conjunto de dados é compatível estatisticamente com o modelo proposto de LV.

Referências:

- 1 AMELINO-CAMELIA, G.; D'AMICO, G. ROSATI, G.; LORET, N. In-vacuo-dispersion features for GRB neutrinos and photons. **Nature Astronomy** , v. 1, p. 0139, 2017. DOI: 10.1038/s41550-017-0139.
- 2 COLLADAY, D.; KOSTELECKÝ, V. A. Lorentz-violating extension of the standard model. **Physical Review D** , v. 58, n. 11, p. 116002, 1998.
- 3 AJELLO, M. *et al* . A decade of gamma-ray bursts observed by Fermi-LAT: the second GRB catalog. **Astrophysical Journal** , v. 878, n. 1, p. 52, 2019.

PG124

Caracterização estrutural e funcional de três enzimas com potencial uso biotecnológico da rota biossintética D-manose / L-galactose do ácido L-ascórbico de *Myrciaria dubia* “camu-camu”.

GARRATT, R. C. ; CABREJOS, D. A. L. ; SANTILLAN, J. A. V. ; GÓMEZ, J. C. C.

richard@ifsc.usp.br

Na Amazônia, os frutos de *Myrciaria dubia* (camu-camu ou araçá) são muito procurados devido ao seu alto teor de L-ácido ascórbico (AsA) ou vitamina C (1), representando uma alternativa para o desenvolvimento de processos biotecnológicos de produção de AsA, entre outros processos. No camu-camu, existem 5 vias metabólicas para a biossíntese de AsA (2), porém nenhuma foi caracterizada nesta espécie. Portanto, o objetivo geral deste trabalho é caracterizar estrutural e funcionalmente três enzimas com potencial uso biotecnológico da via D-manose/L-galactose de camu-camu. As sequências foram otimizadas e ligadas ao vetor de expressão (pET-TOPO), e expressas em *E. coli* Rosetta BL21 (DE3). As três enzimas, L-galactose desidrogenase (GDH), L-galactono- 1,4 - lactona desidrogenase (GalDH) e GDP-D-manose 3',5' epimerase (GME), foram purificadas por cromatografia de afinidade e exclusão molecular. GDH e GalDH provou, em solução, ser um monômero, também mostraram atividade contra L-galactose e L-galactono 1,4- lactona, respectivamente, enquanto GME provou ser dímero, em solução. os ensaios de cristalização foram exitosos para GME e GalDH, porém os dados cristalográficos ainda não foram coletados. É necessário um maior acúmulo de dados para que o entendimento de suas funções seja suficiente.

Referências:

1 ARELLANO ACUÑA, E.; ROJAS ZAVALETA, I.; PAUCAR MENACHO, L. M. Camu-camu (*Myrciaria dubia*): fruta tropical de excelentes propiedades funcionales que ayudan a mejorar la calidad de vida. **Scientia Agropecuaria** , v. 7, n. 4, p. 433–443, 2016. 2 CASTRO, J. C. *et al* . De novo assembly and functional annotation of *Myrciaria dubia* fruit transcriptome reveals multiple metabolic pathways for L-ascorbic acid biosynthesis. **BMC Genomics** , v. 16, p. 997, 2015. DOI: 10.1186/s12864-015-2225-6.

PG125

Physical and chemical properties of acid and acid-alkaline pretreated culms of sugarcane and energy cane varieties grown in Argentina and their correlation with the efficiencies of enzymatic hydrolysis

KANE, A. O. ; PELLEGRINI, V. O. A. ; SANTO, M. C. E. ; POLIKARPOV, I.
aok358@gmail.com

Four sugarcane culm (SCC) varieties (LCP 85-384, NA 78-724, INTA 05-3116, and INTA 05-3118, hereafter named SCCLCP, SCCNA, SCCB1, and SCCB2) were pretreated with diluted acid-alkaline solutions (1) to exploit sugarcane as substrates for biofuel production. Their enzymatic digestibility was evaluated through enzymatic hydrolysis utilizing Cellic CTec3 as a cellulase cocktail.(2) Untreated and pretreated SCC were characterized chemically and physically with X-ray diffraction, Confocal Laser Scanning Microscopy (CLSM) and Scanning Electron Microscopy (SEM). These studies revealed that chemical composition across genotypes differed only in the cellulose content of acid and acid-alkaline pretreated SCC, with the latter pretreatment being more efficient, resulting in a lignocellulosic substrate with maximum cellulose contents of 83.5% for SCCLCP and 80.5% SCCB2. Enzymatic hydrolysis yields increased over time, resulting in maximum enzymatic yields of 98.7% and 97.2% for combined acid-alkaline pretreatment of SCCB2 and SCCLCP, respectively. Overall, crystallinity indices (Crls) accompanied enzymatic yields as Crls were low in untreated SCC, intermediate in pretreated acid SCC, and elevated in acid-alkaline pretreated SCC. High enzymatic yields for combined acid-alkaline pretreatments were explained by SEM and CLSM images, which revealed outstandingly clean and separate cellulosic fibers and clear changes in lignin structure.

Referências:

1 REZENDE C. A., *et al* . Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility, **Biotechnology for Biofuels** , v.. 4, n.54, Nov.2011, DOI: 10.1186/1754-6834-4-54. 2 ESPIRITO SANTO, M. *et al* . Structural and compositional changes in sugarcane bagasse subjected to hydrothermal and organosolv pretreatments and their impacts on enzymatic hydrolysis, **Industrial Crops and Products** , v.. 113, p. 64–74, Mar. 2018, DOI:10.1016/j.indcrop.2018.01.014.

PG126

Desacoplamento dinâmico contínuo generalizado: implementação

HILARIO, A. ; NAPOLITANO, R.

adonai.silva@usp.br

Os computadores quânticos são um artifício de grande interesse para a comunidade científica, pois são capazes de resolver alguns problemas considerados inviáveis e, em alguns casos, impossíveis para computadores clássicos resolverem. Como consequência, possibilitarão avanços em diversas áreas como criptografia, biomedicina e simulações de sistemas quânticos. A unidade de informação básica em um computador clássico é o *bit*, que pode assumir dois valores: 0 ou 1. O análogo para os computadores quânticos é o *qubit*, que além dos estados clássicos $|0\rangle$ e $|1\rangle$ pode também estar em um estado de superposição, isto é, qualquer combinação linear destes. E dada a presença de um segundo *qubit*, existe também a propriedade conhecida como emaranhamento. Estas características dos *qubits* é que possibilitam que um computador quântico seja capaz de solucionar problemas que um computador clássico não consegue. Um dos principais problemas enfrentados no desenvolvimento da computação quântica é a proteção dos *qubits* contra ruídos externos, que destroem a coerência dos estados quânticos. É portanto de extrema importância o estudo de métodos que protegem as unidades de informação quântica contra ruídos, e um destes métodos é o Desacoplamento Dinâmico Contínuo (DDCG). O desejado é que a Hamiltoniana total, que descreve o conjunto "*qubits*" + "ambiente", tenha a forma $\mathcal{H} = \mathcal{H}_q + \mathcal{H}_e$. Porém a natureza não funciona desta forma e o que temos efetivamente é um termo de interação somado, deixando a Hamiltoniana total com a forma $\mathcal{H} = \mathcal{H}_q + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{int}$. A ideia do método é aplicar, em conjunto com a operação quântica desejada, um controle que faz com que o termo \mathcal{H}_{int} passe a ser caracterizado por uma oscilação de alta frequência ao longo da computação, de forma que sua contribuição efetiva ao fim do processo seja nula. (1-2) O objetivo deste trabalho é o estudo de uma generalização deste método para a proteção não apenas de *qubits* mas de *qudits*, isto é, unidades de informação quântica de dimensão d , que podem apresentar vantagens sobre os *qubits* em determinados problemas. *Qudits* podem, portanto, estar em um estado que é uma superposição dos elementos da base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |d-1\rangle\}$. Uma vez concluído o estudo, o objetivo central passou a ser a simulação de uma implementação prática deste método em um caso de *qutrits* ($d = 3$) usando o estado fundamental triplamente degenerado do átomo de ^{87}Rb para identificar os três estados da base computacional. Nesta implementação específica, o controle e a operação quântica são realizados através do uso de lasers e oscilações de Rabi. Assim, foi calculado como as frequências de Rabi variam no tempo para a aplicação de diversas portas lógicas quânticas e posteriormente a simulação também foi feita considerando a interação do sistema de interesse com um banho térmico bosônico (fonte de ruído) para verificar os limites em que a proteção do DDCG são válidas.

Referências:

1 NAPOLITANO, E. J.; FANCHINI, F. F.; BELLOMO, B. **Protecting qudit operations from noise by continuous dynamical decoupling**. 2019. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1912.06775.pdf>. Acesso em 03 set. 2020. 2 FANCHINI, F. F.; HORNOS, J. E. M.; NAPOLITANO, R. J. Continuously decoupling single-qubit operations from a perturbing thermal bath of scalar bosons. **Physical Review A**, v. 75, n. 2, p. 022329, 2007.

PG127

When clock and system interact: Page-Wootters' mechanism

MENDES, L. ; SOARES-PINTO, D. O.

lrs.mendes@usp.br

Although everyone could agree that time passes when questioned about the nature of time, if it is only a parameter or an observable, mixed answers would be given. Some (or perhaps most) would state that time is nothing more than a parameter that appears in Schrodinger's equation and it is representative of a classical clock on the wall of a laboratory. Others would want to elevate time to an observable and put it on an equal footing to other quantities as position and momentum in a similar way that was done in special relativity. (1) What it seems is that if time really is an observable it is an inaccessible one. One solution for the seemingly inaccessibility of time was given by Page and Wootters.(2) They argued that time could not be observed because there may exist a superselection rule (SSR) for the energy, in a similar way that there is a SSR for charge.(3) This statement leads to the question: If there is an SSR for the energy how do we agree that time passes? Page and Wootters proposed that time emerges from correlations between non-interacting subsystems in a way that part or parts of the subsystem act as clocks for the rest, and in respect to which the time flows. Here we investigate the Page-Wootters's conditional probability interpretation for time when clock and system are interacting. We introduced two types of interaction taking the form of an Ising Hamiltonian in a transverse and non-transverse field. It is seen that the interaction between clock and system do not always presents itself as disruptive, being able to improve the mechanism, specially in the regime of high interaction.

Referências:

1 VACCARO, J.A. Quantum asymmetric between time and space. **Proceedings of the Royal Society A** ,v. 472, p.20150670,2016.DOI 10.1098/rspa.2015.0670. 2 PAGE, D. N.; WOOTTERS, W. K. Evolution without evolution: dynamics described by stationary observables **Physical Review D** , v.27,n.12,p. 2885,1983. 3 WICK, G. C.; WIGHTMAN, A. S.; WIGNER, E. P. The intrinsic parity of elementary particles. **Physical Review D** , v.88, n.1, p.101,1952.

PG128

Espalhamento em grafos quânticos

DRINKO, A. ; SOARES-PINTO, D. O.

adrinko@usp.br

Apresentamos um estudo de espalhamento em grafos quânticos utilizando a técnica de funções de Green. (1-2) Grafos são estruturas constituídas de elementos (vértices) que podem ou não estar conectados (arestas) por alguma relação. Definindo uma métrica no grafo podemos definir a equação de Schrödinger ao longo de suas arestas dadas condições de contorno adequadas nos vértices. (1) Desta forma podemos utilizar os grafos como centros de espalhamento a fim de avaliar efeitos de transmissão associados às estruturas dos grafos e como estes efeitos podem ser modificados construindo estruturas mais complexas dadas através da associação de grafos, construindo circuitos em série e em paralelo. (2) A técnica de funções de Green utilizada permite a obtenção das propriedades de espalhamento do grafo de forma bastante simples, uma vez que é necessário apenas sua matriz de adjacência, a qual fornece a conectividade e topologia do grafo (3), para construirmos a amplitude e conseqüentemente o coeficiente de transmissão do centro espalhador. (1-2) A função de Green obtida para grafos pode fornecer os polos da matriz de espalhamento (2) que ao serem analisados no plano complexo pode fornecer os estados de ressonância, estados ligados e estados virtuais existentes no sistema de espalhamento em termos da energia de uma partícula incidente. Utilizando de determinados grafos e analisando suas associações, verificamos o aspecto de regiões de supressão total do sinal da transmissão, além de observarmos picos estreitos de ressonância, as quais se assemelham com ressonâncias topológicas, normalmente obtidas por meio da manipulação dos comprimentos das arestas de um grafo. (3)

Referências:

1 ANDRADE, F. M., *et al* . Green's function approach for quantum graphs: an overview. **Physics Reports** , v. 647, n.1, 2016. DOI 10.1016/j.physrep.2016.07.001. 2 DRINKO, A., F. ; ANDRADE, M. ; BAZEIA, D. Narrow peaks of full transmission in simple quantum graphs. **Physical Review A** , v. 100, n.6, p.062117, 2019. 3 GNUTZMANN, S.; SCHANZ, H.; SMILANSKY, U. Topological resonances in scattering on networks (graphs). **Physical Review Letters** , v.110, n.9, p. 094101, 2013.

PG129

Coherent light-matter interaction in dense atomic clouds

FERNANDEZ, M. F. ; COURTEILLE, P. ; TEIXEIRA, R. C. ; DIAS, P. G. S. ; MAGNANI, P. H. N.
mfrometa93@gmail.com

The main goal of this research is to explore a particular case of light-matter interaction: the diffusion of light in dense samples. In dense samples the short-range interactions of the atomic ensemble cannot be ignored, therefore we can observe the emergence of collective effects such as sub or super-radiance. (1) In this poster we propose an experimental setup for obtaining a dense cloud of ^{88}Sr . Then, to start the study of collective effects, we are going to measure the coherent scattering of low-intensity by the ^{88}Sr cloud. For this, we will use an incident light near-resonant of a two-level atomic structure. We are going to make a comparison between the coherent optical response of the cloud experimentally detected and the theoretical coupled-dipole model. (2) Coherent scattering of light by dense samples was investigated using ^{87}Rb (3), arriving to the conclusion that the coupled-dipole model does not explain this phenomenon. However, as rubidium has a degenerated ground state, they couldn't guarantee the isolation of two-level atomic structure of the kind $J = 0 \leftrightarrow 1$, using ^{88}Sr we can guarantee that.

Referências:

1 ARAÚJO, M. O. *et al* . Superradiance in a large and dilute cloud of cold atoms in the linear-optics regime. **Physical Review Letters** , v. 117, n. 7, p. 073002 -1-073002-6, 2016. 2 COURTEILLE, P. W. *et al* . Modification of radiation pressure due to cooperative scattering of light. **European Physical Journal D** , v. 58, n. 1, p. 69-73, 2010. 3 JENNEWEIN, S. *et al* . Coherent scattering of near-resonant light by a dense, microscopic cloud of cold two-level atoms: experiment versus theory. **Physical Review A** , v. 97, n. 5, p. 053816-1-053816-5, 2018.

PG130

Correlation effects in the emergence of bound spin-state in the continuum

GUESSI, L. H. B. ; OLIVEIRA, L. N. D.

lhbguessi@gmail.com

In 1985 Friedrich and Wintgen proposed a mechanism to generate bound states in the continuum (BIC). (1) The proposed model comprises two non-interacting resonant states coupled to a wave guide. Fine tuning of the couplings turned one of the resonant states into a bound state embedded in the continuum. (1-2) We have studied a more realistic version of the model, which allows for Coulomb repulsion between the electrons in the resonant states. Specifically, we have studied a system of two identical quantum dots side-coupled to a quantum wire in a T-shaped geometry. A two-impurity, one channel Anderson Hamiltonian describes our system. The system is invariant under exchange of the dots; parity is conserved. We therefore work with a bonding (even) and an antibonding (odd) combination of the dot orbitals. In this representation, simple analysis of the Hamiltonian leads to the following results: i) in the non-interacting limit, we recover the results in Ref. (1): the antibonding orbital is a BIC, while the bonding orbital becomes a resonant state; and ii) the Coulomb repulsion introduces three interactions between the electrons in the bonding and anti-bonding orbitals: repulsion between electrons with opposite spins, ferromagnetic spin-flip coupling and isospin-flip coupling. In order to monitor the effects of the three interactions, we have carried out a numerical renormalization group (NRG) computation of the temperature-dependent magnetic susceptibility and of the energy-dependent orbital spectral densities. The NRG method yields essentially exact results with relatively small computation efforts. Our results show that weak Coulomb interaction is sufficient to induce indirectly couple the antibonding orbital to the conduction-band continuum, which effaces the BIC. As the Coulomb repulsion U grows past a critical value, however, the occupation of the antibonding orbital suddenly becomes strictly unitary, a finding that has been reported in an similar system, with somewhat different geometry. (3) Our analysis identifies the origin of the sudden transition and shows that, in the unitary-occupation regime, the antibonding orbital is decoupled from the continuum and hence constitutes a bound magnetic state in the continuum - a spin BIC. The dynamics leading to the spin-BIC formation depends on the strength of the coupling between the dot orbitals and the quantum wire. For weak coupling, as U grows, the bonding and the anti-bonding levels acquire magnetic moments. The antiferromagnetic interaction couples the two moments into a triplet, which the Kondo effect screens to form a doublet as the temperature is lowered. At zero temperature, renormalization-group analysis shows that the doublet is completely decoupled from the conduction band. For strong coupling, the bonding orbital becomes doubly occupied at low temperatures; the freezing out of its degree of freedom bars both spin and isospin flipping. This cuts off the indirect coupling between the antibonding orbital and the conduction band and turns the former into a spin-BIC. These results bring to light an unexpected effect of correlation and may stimulate experimental work in search of spin-BICs in condensed-matter systems.

Referências:

1 FRIEDRICH, H.; WINTGEN, D. Interfering resonances and bound states in the continuum. **Physical Review A** , v. 32, n. 6, p. 3231-3242, 1985. 2 HSU, C. W. *et al* . Bound states in the continuum. **Nature Reviews Materials** , v. 1, n. 9, p. 16048, 2016. 3 ŽITKO, R.; MRAVLJE, J.; HAULE, K. Ground state of the parallel double quantum dot system. **Physical Review Letters** , v. 108, n. 6,

p. 066602-1-066602-5, 2012.

PG131

Influência da heterogeneidade das características de tarefas na sua execução distribuída em redes complexas

LOPES, M. ; TRAVIESO, G.

miguel.lopes.filho@usp.br

Diversos fenômenos consistem em entidades interagindo entre si, devido a isso, é comum utilizar redes complexas para modelá-los. (1) Desde redes de proteínas, até a sociedade humana, passando pela World Wide Web e a disseminação de doenças, muitas das dinâmicas presentes nestes sistemas podem ser reproduzidas com o uso de redes complexas. Porém, o mais interessante para este trabalho são as redes de distribuição de tarefas, as quais são compostas por agentes interligados que são responsáveis por executar tarefas e, quando necessário, delegá-las a outro componente da rede. Entretanto, os estudos deste fenômeno, em geral, encontram-se limitados quanto a homogeneidade das tarefas das quais os agentes são encarregados. (2-3) Este trabalho busca analisar as consequências quando as tarefas são heterogeneas nos seguintes pontos: diferença no tempo necessário para a conclusão da tarefa, denominada por heterogeneidade intrínseca, diferença nas taxas de produção de tarefas por cada um dos nós agentes, nós distintos podem produzir tarefas a taxas distintas, e tal foi denominado por heterogeneidade espacial, e por fim, diferenças nos intervalos de chegada de novas tarefas, denominada por heterogeneidade temporal. Tais heterogeneidades acabam por desbalancear a rede, tornando imprescindível a existência de uma distribuição de tarefas eficiente. Com isso, espera-se uma melhor compreensão de como as propriedades topológicas da rede influenciam na sua capacidade de lidar com essas heterogeneidades.

Referências:

- 1 COSTA, L. F.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; TRAVIESO, G.; RODRIGUES, F. A.; VILLAS-BOAS, P. R.; ANTIQUEIRA, L.; VIANA, .; M. P.; ROCHA, L. E. C. Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: a survey of applications. **Advances in Physics** , v. 60, n. 3, p. 329–412, 2011.
- 2 COSTA, L. F.; TRAVIESO, G.; RUGGIERO, C. A. Complex grid computing. **European Physical Journal B** , v. 44, n. 1, p. 119–128, 2005.
- 3 YANG, G. Complex network based research on the characteristics of grid computing system. *In* : INTERNATIONAL COLLOQUIUM ON COMPUTING, COMMUNICATION, CONTROL, AND MANAGEMENT (ISECS), 2009, Sanya. **Proceedings** [...] Sanya: IEEE, 2009. DOI: 10.1109/CCCM.2009.5268136.

PG132

Analysis of extensive atmospheric showers

SANTANA JUNIOR, A. B. de ; SOUZA, V. D.

alvarobusquet@ifsc.usp.br

Particle astrophysics is a well developed field of research. It also has models that contribute for both astrophysics and particle physics. Cosmic Rays is one of the most important topic in this field and many experiments are in progress in order to study its main terrestrial effect: the atmospheric shower (for more information, see (1)). Besides that, there's still some issues, for example: establish a model to explain measures of the Ultra high energy cosmic rays (UHECR). In this project, we want to focus in the analysis of the muonic component of the shower and study the impact on data made by the introduction of an age parameter in the longitudinal development of the atmospheric shower. Atmospheric showers are cascades of particles produced by particles coming from many sources in space. Their composition varies depending on the original particle and their development can be parametrized by the atmospheric depth and the maximum number of particles created at the same stage of development. Some observatories are dedicated to detect them, for example, the Pierre Auger observatory, that uses a combination of Cherenkov light and fluorescence methods. (2) Although we have precise measurements which confirm the models, it still necessary to complete the picture of the field, for example: the composition of particles in the 10 20 range in the energy spectrum, the exact sources of cosmic rays and information related directly to the atmospheric shower. Here, we want to understand the difference between the amount of muons detected and expected from the interaction theory. Also, we want to verify the universality of the mentioned parametrization for data of unusual conditions. By this time, a few concepts about the theory have been studied such as the characteristics of the atmospheric showers and some calculations for data analyses. In addition, a first contact with the Root package for computational calculation was made. (3) For the next steps, we expect to develop the statistical calculations using the previous tools and knowledge and write down the results for the thesis conclusion.

Referências:

1 STANEV, T. **High energy cosmic rays** . Berlin: Springer-Verlag, 2010. 2 THE PIERRE AUGER COLLABORATION. Properties and performance of the prototype instrument for the Pierre Auger observatory. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A** , v. 523, n. 1-2, p. 50-95, 2004 3 ROOT Data Analyses Framework. Available from: <https://root.cern.ch/> . Accessible at: 1 Oct. 2020.

PG133

Evolução dirigida com linezolida e tedizolida da *Staphylococcus aureus* SA43, representante da linhagem ST5-SCCmecII, e comparação fenotípica de isolados derivados

ZENATTI, L. ; DABUL, A. N. G. ; SILVA, G. V. D. ; CAMARGO, I. L. B. D. C.

leticiazenatti@usp.br

Infecções por *S. aureus* resistentes à meticilina ST5-SCCmecII surgiram em hospitais brasileiros e são um desafio de tratamento devido à multirresistência. A tedizolida (TZD) é a última oxazolidinona aprovada no país para tratar infecções cutâneas por cocos Gram-positivos. (1) Nosso objetivo foi observar mudanças fenotípicas após evolução dirigida (ED) com TZD ou linezolida (LNZ) da *S. aureus* SA43, uma amostra bacteriana clínica brasileira representativa da linhagem internacional ST5-SCCmecII. (2) Nós avaliamos os isolados derivados da ED quanto: i) a alteração do fitness bacteriano determinando o tempo de duplicação (TD), ii) a resistência cruzada a LNZ ou TZD por microdiluição e iii) resistência aos seguintes fármacos por disco difusão: ácido fusídico, amicacina, ciprofloxacina, cloranfenicol, gentamicina, canamicina, quinupristina/dalfopristina e sulfametoxazol/trimetoprim. ED foi realizada expondo in vitro SA43 a níveis crescentes de TZD e LNZ, em paralelo e em triplicatas, usando colônias diferentes (experimentos A, B e C) e caldo Mueller-Hinton cátion ajustado acrescido do fármaco em três concentrações: CIM, 0,5x CIM e 2x CIM. Após incubação a 37 °C por 24 horas, o tubo com a maior concentração de fármaco apresentando crescimento serviu como inóculo para a cultura seguinte. (3) Após repetir esses passos por 34 dias, três cultivos subsequentes foram realizados sem fármacos para estabilização da linhagem. Populações resistentes surgiram em alguns experimentos durante a ED com LNZ, mas não permaneceram. A ED resultou em pequenas alterações nas CIMs das oxazolidinonas. Embora o perfil de suscetibilidade a todos os antibióticos permaneça inalterado, observamos alterações significativas no diâmetro de alguns halos de inibição. Após a exposição à TZD, o diâmetro do halo do ácido fusídico aumentou nos três experimentos. Em relação à exposição à LNZ, o diâmetro dos halos de inibição da amicacina aumentou nos três experimentos, enquanto que o de quinupristina/dalfopristina diminuiu nos experimentos A e C. Houve um maior número de variações de diâmetro dos halos de inibição dos antibióticos no experimento A exposto à LNZ. Comparamos os TD antes e após a exposição a ambas as oxazolidinonas e o TD aumentou em todos os experimentos de ED com TZD e nos experimentos A e C expostos a LNZ (o TD diminuiu no experimento B), sugerindo possíveis alterações no fitness. Em conclusão, este estudo sugere que TZD é tão segura quanto LNZ para esta linhagem, pois a ED resultou em isolados suscetíveis a ambas as oxazolidinonas sem alterar a suscetibilidade a todos os antibióticos testados.

Referências:

1 WILLEKENS, R. *et al* . Early oral switch to linezolid for low-risk patients with *Staphylococcus aureus* bloodstream infections: a propensity-matched cohort study. **Clinical Infectious Diseases** , v. 69, n. 3, p. 381-387, 2019. 2 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. 3 DABUL, A. N. G. *et al* . Resistance in vitro selected tigecycline-resistant methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* sequence type 5 is driven by mutations in mepR and mepA genes. **Microbial Drug Resistance** , v. 24, n. 5, p. 519-526, 2018.

PG134

Number and temperature improvement to achieve a two specie superfluid system of Na and K: the evaporative cooling of Na

OLIVEIRA, G. A. D. ; FARIAS, K. M. ; CASTILHO, P. C. M. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; MAZO, P. ; BAGNATO, V. S. ; SALCEDO, E. G. I.

g.a.oliveira@usp.br

This work is included in a larger research project that aims to obtain a double Sodium and Potassium Bose-Einstein condensate, with the possibility of varying the interspecies interaction for the study of aspects of superfluids in different regimes. Through the use of techniques such as stirring beam and Feshbach resonances it will be possible to study the vortex nucleation in a two species BEC with adjustable interactions, exploring the different miscibility regimes between the species, as well as formation and studies in quantum turbulence. Other groups already have obtained double condensates (1), including of Na and K. (2) For that, it is necessary to have a large amount of atoms of both sodium and potassium captured in our science chamber at very low temperatures. To increase the number of captured potassium atoms, we have optimized the Zeeman slower technique and 2D-MOT, from which we will discuss. We have worked also to optimize the Evaporative Cooling process for Sodium in its route to condensation. (3) For that we have characterized all the RF ramps, and it was possible to optimizing them acting on the relation between Number \times Temperature to obtain the condition of run way evaporation. Both aspects will be discussed in this presentation, and we will show the actual status of the experiment.

Referências:

1 EJNISMAN, R. *et al.* Studies of two-species Bose-Einstein condensation. **Optics Express** , v. 2, n. 8, p. 330-337, 1998. 2 SCHULZE, T. A. *et al.* . Feshbach spectroscopy and dual-species Bose-Einstein condensation of ^{23}Na - ^{39}K mixtures. **Physical Review A** , v. 97, n. 2, p. 023623-1-023623-9, 2018. 3 LYE, J. E. *et al.* . Images of evaporative cooling to Bose-Einstein condensation. **Journal of Optics B** , v. 4, n. 1, p. 57-61, 2002.

PG135

Propriedades ópticas não-lineares de guias de onda produzidas por pulsos de femtossegundos em Gorilla® Glass

HENRIQUE, F. R. ; ALMEIDA, G. F. B. D. ; MARTINS, R. J. ; ROSA, R. G. T. ; SIQUEIRA, J. D. P. ; ANDRADE, M. B. D. ; MENDONCA, C.

francielerenata@usp.br

Gorilla® Glass é um vidro da família dos alcali-aluminossilicatos comumente utilizado como tela de proteção em dispositivos móveis, como celulares, *tablets*, *laptops*, etc. Isso se deve a suas excelentes propriedades mecânicas, resultantes de um tratamento de troca iônica, que o tornam menos suscetível a riscos e quebras que outros vidros de *display*. (1) Estudos recentes mostraram que o *Gorilla® Glass* também é um material promissor para a fabricação de guias de onda com pulsos de femtossegundos, com a capacidade de se produzir guias cujos modos apresentam perfil espacial bem comportado e baixas perdas de guiamento. (2) Como forma de permitir a incorporação dessas guias em dispositivos fotônicos e orientar sua aplicação a áreas específicas, se faz necessária a caracterização de suas propriedades ópticas não-lineares. O índice de refração não-linear do *Gorilla® Glass* foi determinado anteriormente e é dado por $3.3 \times 10^{-20} m^2/W$. (3) No entanto, a caracterização não-linear de guias de onda produzidas pela irradiação com pulsos de femtossegundos nesse material ainda se faz necessária, pois o processo de interação dos pulsos ultracurtos com a matéria ainda não é completamente compreendido, podendo levar a modificações no índice de refração não-linear. Dessa forma, nesse trabalho realizamos a caracterização do índice de refração não-linear de guias de onda produzidas em *Gorilla® Glass* com diferentes parâmetros de fabricação. Tal caracterização foi feita através da técnica de *D-scan* (*Scan* da Dispersão), análogo temporal da técnica de *Z-scan*, na qual são avaliadas as modificações espectrais sofridas por um pulso ultracurto ao atravessar um meio não-linear devido ao fenômeno da automodulação de fase. Nossos resultados mostram que o valor do índice de refração não-linear das guias de onda estudadas é inferior ao do material *bulk* e depende dos parâmetros de escrita. Mais especificamente, quanto maior a energia de pulso utilizada no processo de escrita a laser, menor o índice de refração não-linear resultante. Além disso, a caracterização do material irradiado através de Espectroscopia Raman revelou que tal redução no valor do índice de refração não-linear pode estar associada a modificações nos oxigênios não-ligantes da matriz vítrea.

Referências:

- 1 BALL, P. Material witness: concrete mixing for gorillas. *Nature Materials*, v. 14, n. 5, p. 472, 2015.
- 2 LAPOINTE, J. *et al*. Making smart phones smarter with photonics. *Optics Express*, v. 22, n. 13, p. 15473-15483, 2014.
- 3 ALMEIDA, G. F. B. *et al*. Third-order optical nonlinearities in bulk and fs-laser inscribed waveguides in strengthened alkali aluminosilicate glass. *Laser Physics*, v. 28, n. 1, p. 015401-1-015401-5, 2018.

PG136

Renormalons in integrated spectral function moments and strong coupling extractions

OLIANI, F. ; BOITO, D.

fabio.oliani@usp.br

Integrated spectral function moments plays an important role in precise α_s extractions from $\tau \rightarrow (\text{hadrons}) + \nu_\tau$ and $e^+e^- \rightarrow (\text{hadrons})$ below the charm threshold. We study how the renormalons of polynomial moments, which are singularities in the Borel plane, are related with the perturbative behaviour of the respective asymptotic series (1), first in the large- β_0 limit and then in Quantum Chromodynamics (QCD). The renormalon content can produce good or bad perturbative behaviors of the series depending on the moment used. In the large- β_0 limit, where the results are known exactly, we can observe how partial cancellations of renormalons lead to series which have good perturbative behavior and how the first IR renormalon leads to bad perturbative behavior. Then, using a convenient scheme transformation (C scheme) (2) together with the modified Borel transform we can show that the leading IR singularity becomes a simple pole and the mathematical structure of Borel transform of polynomial moments is equal in QCD and large- β_0 , thus the conclusions obtained in that limit can be extended to full QCD. (3)

Referências:

- 1 BENEKE, M.; JAMIN, M. α_s and the τ hadronic width: fixed-order, contour-improved and higher-order perturbation theory. **Journal of High Energy Physics**, v. 2008, n. 09, p. 044-1-044-41, 2008.
- 2 DOITO, D.; JAMIN, M.; MIRAVITLLAS, R. Scheme variations of the QCD coupling and hadronic τ decays. **Physical Review Letters**, v. 117, n.15, p. 152001-1-152001-5, 2016.
- 3 BOITO, D.; OLIANI, F. Renormalons in integrated spectral function moments and α_s extractions. **Physical Review D**, v. 101, n. 7, p. 074003-1-074003-16, 2020.

PG137

Purificação quântica através de um estado quádruplo para incluir ruído ambiental e aparato de medida na investigação do conceito de complexidade quântica

AUDI, G. ; NAPOLITANO, R.

gabriel.nogueira.monteiro@usp.br

Utilizando as definições usuais de complexidade quântica como guias (1-2), neste mestrado pretendemos investigar como poderia ser generalizada a complexidade quântica de um algoritmo quântico, como o algoritmo de Deutsch-Jozsa (3) sob a influência ruidosa do ambiente. Simultaneamente, porém, vamos considerar também um processo de observação, pelo menos como parte do processamento da informação ao longo da execução do algoritmo. Para poder tratar esse problema, propomos introduzir uma purificação envolvendo quatro espaços de Hilbert idênticos e considerar um estado quádruplo. Faremos uso desse quádruplo produto tensorial de espaços de Hilbert idênticos com inspiração provida pela gravitação quântica, onde é utilizado o chamado estado duplo térmico de campos. Trataremos tanto o ambiente como o processo de medida como campos bosônicos e, assim, muito do que já foi feito no caso do estado duplo térmico de campos poderá ser utilizado.

Referências:

1 NIELSEN, M. A. *et al* . Quantum computation as geometry. **Science** , v. 311, n. 5764, p. 1133-1135, 2006. 2 BROWN, A. R.; SUSSKIND, L. Complexity geometry of a single qubit. **Physical Review D** , v. 100, n. 4, p. 046020-1-046020-20, 2019. 3 DEUTSCH, D.; JOZSA, R. Rapid solution of problems by quantum computation. **Proceedings of the Royal Society of London A** , v. 439, n. 1907, p. 553-558, 1992.

PG138

Mapeamento do campo elétrico em transistores poliméricos por microscopia SFG

SOUSA, M. S. ; MIRANDA, P. B.

marcos.silva_sousa@ifsc.usp.br

Atualmente direciona-se muita atenção aos polímeros conjugados (PCs). Estes são materiais que combinam as propriedades elétricas e ópticas de semicondutores, com as propriedades químicas e mecânicas de polímeros. Possuem várias aplicações potenciais em dispositivos optoeletrônicos e, portanto, figuram centralmente na pesquisa mundial em materiais de alto desempenho. Não obstante estudos e gradual melhoramento de dispositivos à base de PCs, ainda há uma grande disparidade de eficiência e durabilidade em relação aos dispositivos inorgânicos. Assim sendo, o entendimento completo de como ocorrem os eventos físicos e químicos nos dispositivos requer mais esforços a fim de otimizar o desempenho e durabilidade dos mesmos. Nesse sentido, um tema importante para o entendimento dos mecanismos de funcionamento de transistores por efeito de campo à base de semicondutores orgânicos (OFETs) é o mapeamento do campo elétrico na camada dielétrica do OFET, que é diretamente proporcional à densidade de carga no canal, e sua comparação com modelos teóricos do funcionamento de OFETs. Para tal estudo, utilizaremos polímeros conjugados (PC) como semicondutores orgânicos, e a principal técnica experimental a ser empregada será a espectroscopia vibracional por Geração de Soma de Frequências (SFG – do inglês Sum-Frequency Generation), ou simplesmente espectroscopia SFG. (1) Esta técnica permite obter o espectro vibracional de moléculas na interface sem contribuição do volume do material, quando este é centrossimétrico. No entanto, quando um material isotrópico (o dielétrico dos OFETs) é submetido a um campo elétrico intenso, ele quebra a simetria de inversão do meio e produz o processo de SFG. Assim, a espectroscopia SFG pode ser utilizada para medir o campo elétrico no interior da camada dielétrica em OFETs. Portanto, imagens obtidas por microscopia SFG do dispositivo em funcionamento podem mapear o campo elétrico na camada dielétrica dos OFETs, que é proporcional à densidade de carga ao longo do canal. Ela será então comparada a modelos teóricos para o funcionamento de OFETs. (2-3) Tal comparação servirá para validar os modelos teóricos e indicar fenômenos que precisam ser incorporados na descrição completa do seu funcionamento. Com isso esperamos compreender melhor o funcionamento de OFETs e este estudo pode ter implicações importantes para a melhoria do desempenho de dispositivos optoeletrônicos orgânicos.

Referências:

1 LAMBERT, A. G.; DAVIES, P. B.; NEIVANDT, D. J. Implementing the theory of sum frequency generation vibrational spectroscopy: a tutorial review. **Applied Spectroscopy Reviews** , v. 40, n. 2, p. 103-145, 2005. 2 ZAUMSEIL, J.; SIRRINGHAUS, H. Electron and ambipolar transport in organic field-effect transistors. **Chemical Reviews** , v. 107, n. 4, p. 1296-1323, 2007. 3 SCHMECHEL, R.; AHLES, M.; VON SEGGERN , H. A pentacene ambipolar transistor: experiment and theory. **Journal of Applied Physics** , v. 98, n. 8, p. 084511-1-084511-6, 2005.

PG139

Nanopartículas funcionalizada com siRNA de um oncogene modulam os mecanismos antitumorais de macrófagos.

COMPARETTI, E. ; ZUCOLOTTI, V.

edsoncomparetti@gmail.com

O câncer é a doença crônica mais recorrente no mundo e a incidência de carcinoma hepatocelular humano (hepatocellular carcinoma - HCC) está entre as maiores causas de óbitos, exigindo novas abordagens de diagnósticos e terapêuticas para reduzir a frequência de recidivas e metástases. (1) As células neoplásicas têm a capacidade de escapar da vigilância imunológica, modulando o microambiente tumoral para favorecer a progressão da doença no organismo. Os nanocompósitos podem ser usados para prevenir a expressão de proteínas imunossupressoras e citocinas, aumentando a atividade dos principais mecanismos da imunidade celular. (2) Este estudo tem como objetivo desenvolver um nanocarreador para transportar agentes imunomoduladores para células tumorais e células imunocompetentes. Nanopartículas foram sintetizadas com lipídios e proteínas da membrana plasmática de células neoplásicas para entregar uma grande quantidade de material antigênico às células apresentadoras de antígenos profissionais (APC). Para estabelecer uma resposta pró-inflamatória, nanopartículas lipídicas foram incorporadas com monofosforil lipídio A e sequência de oligonucleotídeo (siRNA) para silenciar o oncogene c-Myc. Em seguida, as nanopartículas foram expostas as células HCC, monócitos do sangue periférico de doadores saudáveis e macrófagos gerados *in vitro*. Os nanocarreadores foram testados quanto a: a) internalização de nanopartículas em células cancerosas e imunocompetentes, b) atividade imunomoduladora, observando a expressão de marcadores de superfície celular e produção de citocinas e c) citotoxicidade dos nanocarreadores. A captação foi analisada por microscopia de fluorescência e a citotoxicidade por citometria de fluxo. Nossos resultados demonstram redução na expressão de proteínas que garantem a proliferação celular das células cancerígenas e nos macrófagos aumento de expressão de proteínas reguladoras da resposta inflamatória, modulando positivamente a ação das células apresentadoras de antígeno (APCs).

Referências:

1 BRAY, F. *et al* . Global cancer statistics 2018: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries. **CA** : a cancer journal for clinicians, v. 68, n. 6, p. 394-424, 2018. 2 BEATTY, G. L; GLADNEY, W. L. Immune escape mechanisms as a guide for cancer immunotherapy. **Clinical Cancer Research** , v. 21, n. 4, p. 687-692 2015.

PG140

Estudo da mobilidade iônica e efeitos conformacionais de condutores mistos utilizando as técnicas de frente móvel e interferômetro de Michelson-Morley

UNIGARRO, A. D. P. ; FARIA, G.

ap.unigarro@ifsc.usp.br

Condutores orgânicos mistos (OMC) são materiais poliméricos com ampla gama de aplicações devido ao fato de conduzirem cargas eletrônica e carga iônica simultaneamente e com similar eficiência. (1) Devido a injeção de íons no volume do OMC, estados polaronicos são criados no band-gap, provocando alterações na absorção óptica do material. (1) Concomitantemente, a absorção de moléculas de solvente e íons pela matriz polimérica altera a conformação do material, causando efeitos de dilatação do filme polimérico. (2) Neste trabalho, serão feitas medições usando o experimento da frente móvel para investigar o movimento iônico no interior do polímero PEDOT:PSS e os subsequentes efeitos electrocrômicos produzidos. Simultaneamente o interferômetro de Michelson e Morley será utilizado para estudar a mudança de espessura do filme de OMC, para diferentes solventes e assim ter uma melhor compreensão dos fenômenos de transporte iônico e da interação eletrólito-OMC.

Referências:

1 STAVRINIDOU, E. *et al* . Direct measurement of ion mobility in a conducting polymer. **Advanced Materials** , v. 25, n. 32, p. 4488-4493, Aug. 2013. 2 KAPPERT, E. J. *et al* . Swelling of 9 polymers commonly employed for solvent-resistant nanofiltration membranes: a comprehensive dataset. **Journal of Membrane Science** , v. 569, p. 177-199, Jan. 2019.

PG141

Prospecção da interface de interação no processo de polimerização da enzima Glutaminase C

ABREU, F. M. O. ; RODRIGUES, C. T. ; DIAS, S. M. G. ; AMBROSIO, A.

flavia.abreu@usp.br

A glutamina é um dos nutrientes essenciais para o metabolismo de células cancerosas. É metabolizada pela enzima glutaminase, que apresenta quatro isoformas em humanos. Assim, converte-se em glutamato, estando diretamente relacionada à produção energética e biossintética das células. (1) Particularmente, a isoenzima Glutaminase C (GAC), presente em níveis elevados e com localização celular distinta em linhagens celulares tumorais, pode se organizar em diferentes estruturas, apresentando, dessa forma, variações em sua eficiência enzimática. (2-3) Estudos recentes de nosso grupo sugerem que a espécie mais ativa de GAC seja constituída por filamentos decorrentes de sua polimerização a partir de unidades tetraméricas, propondo um novo modelo de organização e interação baseado no empilhamento lateral dessa proteína, do qual resulta uma estrutura helicoidal. No entanto, para a confirmação do modelo indicado, são necessários experimentos que avaliem diretamente a interface de interação proteica predita, originalmente obtida por crio-microscopia eletrônica de transmissão. Frente a essas considerações, este projeto visa à introdução de mutações sítio-dirigidas na GAC, a fim de verificar seu efeito na estrutura e ativação enzimática da proteína. Estão se realizando ensaios para (i) obter, por expressão heteróloga, e purificar a proteína recombinante na forma selvagem e com diversas mutações pontuais, (ii) caracterizar a ausência de polimerização através de estudos biofísicos de espalhamento de luz dinâmico (DLS) e (iii) verificar a diminuição da eficiência catalítica, decorrente da incapacidade de formar polímeros, determinando-se a quantidade de glutamina convertida a glutamato a partir do monitoramento da formação de NADH. Estes estudos serão críticos para a confirmação do novo modelo estrutural sugerido e o aumento da compreensão sobre seu funcionamento, podendo auxiliar no desenvolvimento de novas terapias focando no metabolismo específico da glutamina pela GAC.

Referências:

1 DEBERARDINIS, R. J.; CHENG, T. Q's next: the diverse functions of glutamine in metabolism, cell biology and cancer. **Oncogene**, v. 29, n. 3, p. 313-324, 2010. 2 CASSAGO, A. *et al*. Mitochondrial localization and structure-based phosphate activation mechanism of Glutaminase C with implications for cancer metabolism. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 109, n. 4, p. 1092-1097, 2012. 3 FERREIRA, A. P. S. *et al*. Active Glutaminase C self-assembles into a supratetrameric oligomer that can be disrupted by an allosteric inhibitor. **Journal of Biological Chemistry**, v. 288, n. 39, p. 28009-28020, 2013.

PG142

NaTaO₃ dopado com Bi para a divisão fotocatalítica da água sob luz solar simulada: uma transição pseudo-cúbica induzida por dopagem

ALVES, G. A. S. ; GONÇALVES, R. V.

gasalves@usp.br

O tantalato de sódio (NaTaO₃) é um material promissor para a produção de gás hidrogênio (H₂) pela divisão fotocatalítica da água, ainda que sua larga banda proibida (band gap) impossibilite sua aplicação sob luz solar. Neste contexto, a dopagem com bismuto tem sido proposta como um meio simples de introduzir estados eletrônicos entre as bandas de valência e condução, possibilitando assim a absorção de fótons menos energéticos do espectro solar. (1) Neste trabalho, nanocubos de NaTaO₃ dopados com Bi foram obtidos pelo método de sal fundido, de modo que o material apresenta uma estável evolução de H₂ sob luz solar simulada (AM 1.5G). Análises por Difração de Raios-X, espectroscopia Raman e UV-vis sugerem que a incorporação dos cátions Bi³⁺ no sítio Ta induz um considerável encurtamento no band gap, além de uma transição estrutural, pela qual a estrutura ortorrômbica do NaTaO₃ torna-se pseudo-cúbica (2-3) sob baixas concentrações do dopante (0.5 a 4 mol%). Por fim, o material dopado com 3 mol% de Bi foi carregado com nanopartículas co-catalisadoras de Ni pela técnica de pulverização catódica (sputtering), levando assim a um aprimoramento substancial na produção fotocatalítica de hidrogênio.

Referências:

1 KANHERE, P.; ZHENG, J.; CHEN, Z. Visible light driven photocatalytic hydrogen evolution and photophysical properties of Bi³⁺ doped NaTaO₃. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 37, p. 4889–4896, 2012. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2011.12.056 2 HU, C-C.; TENG, H. Influence of structural features on the photocatalytic activity of NaTaO₃ powders from different synthesis methods. **Applied Catalysis A** : general, v. 331, p. 44–50, 2007. DOI: 10.1016/j.apcata.2007.07.024. 3 ARULNESAN, S. W.; KAYSER, P.; KENNEDY, B. J.; JUSTIN, A.; KNIGHT, K. S. Phase separation in NaTaO₃. Impact of temperature and doping. **Solid State Sciences**, v. 52, p. 149–153, 2016. DOI: 10.1016/j.solidstatesciences.2016.01.001.

PG143

Efeitos de strain em semicondutores III-V

SIQUEIRA, A. ; SIPAHI, G. M.

anderson.siqueira@usp.br

Na década de 1990 houve uma grande produção de publicações relacionadas a teoria e experimentos de estruturas de bandas, envolvendo semicondutores na fase wurtzita. Materiais formados por compostos de GaN, AlN e InN usados em lasers e LEDs, foram objetos de estudos resultando em uma quantidade considerável de publicações sobre materiais com simetria hexagonal. Em Chuang e Chang (1) encontramos uma base teórica para o cálculo da estrutura de bandas da wurtzita na forma *bulk*, desenvolvida com base no modelo para cristais zinblende. Nesse trabalho de Chuang e Chang (1), a estrutura de bandas para as bandas de valência são calculadas por um Hamiltoniano matricial 6×6 , além de também calcular o Hamiltoniano matricial 6×6 de strain e seus efeitos sobre as estruturas de bandas, na direção de crescimento (0001). As propriedades ópticas e eletrônicas são influenciadas pela direção de crescimento do cristal de semicondutor. Mireles e Uloa (2) apresentam uma derivação para o Hamiltoniano 6×6 para a banda de valência válidos para substratos de wurtzita III - V em uma direção arbitrária (h0il), incluindo efeitos de strain. No estudo conduzido por Faria Junior e colaboradores (3) foi desenvolvido um hamiltoniano $\mathbf{k.p}$ 8×8 que descreve as bandas de energia em torno do ponto Γ , para calcular as estruturas de bandas para InAs and InP em *bulk* na fase wurtzita na direção (0001). Trata-se de um modelo robusto, como uma abordagem mais realística, que descreve características importantes da estrutura de bandas incluindo as interações inter bandas de valência, entre as bandas de condução e de valência e os efeitos de spin splitting. Os efeitos de spin splitting, que são frequentemente negligenciados na literatura, são descritos de forma corretamente devido ao termo spin-órbita dependente de k do Hamiltoniano $\mathbf{k.p}$. (3) Neste trabalho, o Hamiltoniano $\mathbf{k.p}$ desenvolvido em (3) será rotacionado em várias direções usando uma matriz de rotação M 8×8 e partir desse Hamiltoniano, será determinado o Hamiltoniano de strain em uma direção arbitrária e em cada direção, analisaremos os efeitos de strain sobre as estruturas de bandas.

Referências:

1 CHUANG, S. L; CHANG, C. S. *k.p* method for strained wurtzite semiconductors. **Physical Review B**, v. 54, n. 4, p. 2491-2504, 1996. 2 MIRELES, F.; ULLOA, S. E. Strain and crystallographic orientation effects on the valence subbands of wurtzite quantum wells. **Physical Review B**, v. 62, n. 4, p. 2562-2572, 2000. 3 FARIA JUNIOR, P. E. *et al*. Realistic multiband $\mathbf{k.p}$ 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.

PG144

Propriedades termodinâmicas de horizontes causais II: aspectos semiclássicos

BARBOSA, M. G. ; VANZELLA, D.

matheusgb@ifsc.usp.br

Nas últimas décadas, vários estudos têm sugerido uma forte relação entre gravitação e termodinâmica, como os resultados da bem estabelecida termodinâmica de buracos negros e a derivação das equações de campo de Einstein através de argumentos termodinâmicos. (1) Contudo, apesar da crescente solidez destes resultados, se estendendo para vários modelos de gravitação, as propriedades termodinâmicas de sistemas gravitacionais ainda se apresentam de forma bastante misteriosa e os graus de liberdade microscópicos que podem dar origem ao comportamento termodinâmico são pouco conhecidos. Desta forma, tentativas de generalização destes resultados e de descrever como a gravidade engloba aspectos termodinâmicos tornam-se de especial importância no desenvolvimento de teorias da gravitação e na solução de problemas fundamentais da física, tais como a existência da energia escura. Buscando avançar neste sentido, o presente projeto visa estudar um aspecto sempre presente nesta relação entre gravitação e termodinâmica, que é a presença de horizontes causais. Tais horizontes dividem o espaço-tempo em regiões que podem ter uma influência causal sobre um dado observador e regiões separadas causalmente deste. Sendo a principal característica destes horizontes o fato deles privarem seu observador de informação, pretende-se analisar o comportamento de campos quânticos na presença destes horizontes e como a teoria de informação quântica pode ser usada para definir uma entropia a partir da informação encoberta pelo horizonte. Além disso, a formulação lagrangiana da relatividade geral requer termos de superfície no funcional da ação, os quais podem ser identificados com a entropia de buracos negros (2) e parecem ser compatíveis com a definição de entropia para os chamados “horizontes de Rindler locais” dada em (1). Observando também que estudos recentes (3) reforçam a relação entre quantidades termodinâmicas e estes termos de superfície em casos nos quais ela corresponde a um horizonte causal, outro objetivo a ser seguido neste projeto é o estudo do mecanismo que permite estes termos de superfície corresponderem à informação encoberta por horizontes causais e analisar a viabilidade de usá-los em uma definição local da entropia associada ao espaço-tempo.

Referências:

1 JACOBSON, T.; PARENTANI, R. Horizon entropy. **Foundations of Physics** , v. 33, n. 2, p. 323-348, Feb. 2003. 2 HAWKING, S. W.; HOROWITZ, G. T. The gravitational Hamiltonian, action, entropy and surface terms. **Classical and Quantum Gravity** , v. 13, n. 6, p. 1487-1498, June 1996. 3 CHAKRABORTY, S.; PADMANABHAN, T. Boundary term in the gravitational action is the heat content of the null surfaces. **Physical Review D** , v. 101, n. 6, p. 064023-1-064023-9, Mar. 2020.

PG145

Quais os papéis da matemática no desenvolvimento científico? Uma história da “tese da matematização”

FERRERIA, C. T. T. ; SILVA, C. C.

ciro.ferreira@usp.br

O surgimento da noção da matematização da ciência como processo histórico coeso origina-se juntamente com outra categoria historiográfica: a Revolução Científica. No século 20, a chamada “revolução científica” é transformada em tese historiográfica na qual o corpo de conhecimento que posteriormente seria nomeado “científico” se diferencia radicalmente da filosofia escolástica antiga. O historiador mais famoso associado a essa ideia é Koyré (1892 - 1964), mas dois de seus contemporâneos também foram igualmente importantes em seu desenvolvimento: Dijksterhuis (1892 - 1965) e Edwin Arthur Burt (1892 - 1989). Existem consideráveis diferenças entre suas obras, mas todas se embasam na noção de que a matematização da natureza é um dos pontos cruciais para se compreender a história do desenvolvimento científico. Gorham *et al.* (1) chamaram de “tese da matematização” a afirmação de que a ascensão da abordagem matemática da natureza foi o acontecimento mais relevante na história da ciência ocidental. A matematização da natureza é incorporada em cada uma das narrativas de diferentes maneiras e com ênfases distintas. Para Koyré, o tratamento matemático dos fenômenos é um fator importante para o desenvolvimento de conceitos físicos fundamentais, como o da inércia, que são cruciais para a transição de uma cosmovisão de um mundo fechado para um universo infinito. Para Dijksterhuis, o nascimento da ciência moderna se dá com a mecanização da visão de mundo, ou seja, utilizando a mecânica clássica enquanto disciplina matemática como modelo para o desenvolvimento de outras teorias. A preocupação central de Burt, por sua vez, não é o impacto que a matemática exerceu nos conteúdos da ciência, mas sim como a metafísica da ciência moderna, norteadas por uma visão matemática de mundo, afetava o valor do ser humano no mundo. A ênfase de historiadores sobre a matematização da natureza começa a se diluir por volta da década de 1950. Um exemplo disso são as narrativas de “duas tradições” de Kuhn e Westfall. Kuhn considera o desenvolvimento paralelo de duas tradições, a das ciências matemáticas clássicas; e a das ciências baconianas, que contemplam as disciplinas de teor predominantemente empírico. Já as tradições consideradas por Westfall são a platônica (coincide grosso modo com as ciências clássicas de Kuhn) e democritiana. A segunda conteria a filosofia mecanicista, preocupada com a causalidade e descrição corpuscularista dos fenômenos. Nas últimas décadas do século 20, os papéis da matemática na ciência continuaram pautando obras importantes, enfatizando aspectos sociais. Shapin, por exemplo, reforça a resistência de alguns cientistas à matemática, ilustrando com a crítica de Boyle, que considerava que a matemática iria restringir o acesso do grande público à ciência. Nessa mesma linha, Gingras aponta como a aplicação da matemática na ciência acarretou efeitos colaterais de ordem social, epistemológica e ontológica. Neste trabalho, exploramos como a noção de matematização da ciência enquanto ferramenta histórica foi utilizada de diferentes formas ao longo do desenvolvimento da história da ciência como disciplina, iniciando como eixo central nas narrativas da Revolução Científica na primeira metade do século 20, sendo diluída na segunda metade e criticada ao fim do século.

Referências:

1 GORHAM, G. (ed.) *et al.* **The language of nature: reassessing the mathematization of natural philosophy in the seventeenth century.** Minnesota, University of Minnesota, 2016.

PG146

The effects of WO₃ content in phosphate glasses on the energy transfer process between trivalent rare earth dopant ions

FARIA, W. ; CAMARGO, A. D.

walter.faria@usp.br

Phosphate glasses (99.3-x (NaPO₃)₆ - x WO₃ - 0.5 Eu₂O₃ - 0.2 Tb₄O₇) with a varying concentration of WO₃ (x = 5, 10, 15, 20 and 40 mol%) were studied from the spectroscopic point of view. The high polarizability of this oxide glass component affects the intensities of the dopant ions' transitions which, in turn, can be used to detect structural changes in the glass network. To that end, Europium (Eu³⁺) is used as a dopant for it is the best structural probe in the lanthanide series. (1) The energy transfer process between two rare earth ions is not affected by the WO₃ polarizability but by the changes in glass structure introduced by this glass modifier oxide. Therefore, the characterization of transfer rates is also of interest and all glasses are co-doped with Eu³⁺ and terbium (Tb³⁺). The mol% concentration of both Eu³⁺ and Tb³⁺ are kept constant. Up to 20 mol% WO₃, minor although clear changes can be seen in all optical parameters: relative emissions intensities, excited state lifetimes, phonon sidebands and host's energy gap. For the sample with highest WO₃ concentration (40 mol%) great changes appear, indicating a very different structural organization for this system, which is corroborated by other spectroscopic results. (2) The most notorious findings are the enhanced Eu³⁺ emission with increasing WO₃ content, the great decrease in emission lifetimes for both ions and the shape of the phonon sidebands. The latter clearly indicates a different environment for the lanthanides in the 40 mol% WO₃ glass while the other two point to a more efficient energy transfer from Tb³⁺ to Eu³⁺. Some explanations to the observed changes are discussed, including the higher density of the glasses containing more WO₃ content, the polarizability effect on the transitions' intensities and the role played by the phonons in the energy transfer rates. These findings for the Tb³⁺-Eu³⁺ co-doped system give enough formation for the modeling of other co-doped systems such as the well-known Yb³⁺-Er³⁺ where upconversion occurs. Future work will investigate different lanthanide concentrations aiming at the separation between the electric dipole and the dynamic coupling contributions to the transitions' intensities, an important feature since only the former affects the energy transfer rates.

Referências:

1 BINNEMANS, K. Interpretation of europium(III) spectra. *Coordination Chemistry Reviews* , v. 295, p. 1-45, July 2015. 2 ARAUJO, C. C. de *et al* . Structural studies of NaPO₃-WO₃ glasses by solid state NMR and Raman spectroscopy. *Journal of Material Chemistry* , v. 16, n. 32, p. 3277-3284, 2006.

PG147

Estudos de relação estrutura-atividade de derivados do Brussonol como candidatos a compostos líderes para a Malária

BARBOSA, C. D. S. ; AGUIAR, A. C. C. ; GUIDO, R. V. C. ; AHMAD, A. ; BURTOLOSO, A. C. B.
camilasbarbosa@ifsc.usp.br

A malária é uma doença milenar que ainda atinge milhões de pessoas anualmente. Estima-se que 228 milhões de pessoas foram acometidas por essa infecção, sendo que a região Africana da Organização Mundial da Saúde (OMS) concentrou 93% dos casos (213 milhões), enquanto a região Americana da OMS reportou 0,4% (929 mil) dos casos, somente no ano de 2018. Apesar da diminuição na taxa de mortalidade observada no decorrer dos últimos anos, as crianças abaixo de 5 anos de idade ainda correspondem a 67% (272 mil) das mortes. (1) O uso de plantas com objetivo medicinal integra a história da humanidade. Esse conhecimento da medicina tradicional vem sendo empregado para o desenvolvimento de novos tratamentos de doenças, como a malária e o câncer por exemplo, de forma que hoje o meio ambiente se constitui em uma importante fonte de estruturas químicas inéditas para a descoberta de novas drogas. (2) Nesse contexto, os icetexanos têm despertado o interesse da comunidade científica devido ao amplo espectro de atividade biológica que essa classe de compostos apresenta, assim como à sua estrutura química única. Os icetexanos pertencem à família dos produtos naturais diterpenos, os quais já foram isolados de diversas plantas, sendo o Brussonol um de seus representantes. (3) Diante disso, o objetivo deste trabalho é avaliar e caracterizar a atividade antiplasmodial do Brussonol e seus derivados. O Brussonol mostrou-se ativo contra a cepa 3D7 (sensível à cloroquina) ($IC_{50}3D7 = 8 \pm 2 \mu M$) do *Plasmodium falciparum* e apresentou baixa citotoxicidade ($IC_{50}HepG2 = 67 \pm 4 \mu M$), o que indica que essa molécula apresenta seletividade para o parasito ($SI = 8,4$). Adicionalmente, o estudo da relação estrutura-atividade de derivados do Brussonol nos permitiu definir quais componentes estruturais são importantes para sua atividade. Além disso, a avaliação da atividade do Brussonol contra um painel de cepas resistentes do protozoário revelou que o índice de resistência (IR) foi aproximadamente 1, portanto, o Brussonol não apresentou resistência cruzada com as cepas resistentes avaliadas, o que pode indicar que essa classe de compostos apresente um novo mecanismo de ação. As perspectivas deste trabalho consistem em fazer um estudo detalhado da atividade antiplasmodial dessa classe de compostos e definir seu mecanismo de ação.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. Global Malaria Programme. **World malaria report 2019**. Geneva: WHO, 2019. 2 THOMFORD, N. E. *et al*. Natural products for drug discovery in the 21st century: innovations for novel drug discovery. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 19, n. 6, p. 1578, 2018. 3 SIMMONS, E. M.; SARPONG, R. Structure, biosynthetic relationships and chemical synthesis of the icetexane diterpenoids. **Natural Product Reports**, v. 26, n. 9, p. 1195–1217, 2009.

PG148

Perturbando o líquido de Ssin de Kitaev com desordem

MEIRELES, V. D. ; ANDRADE, E.

vitordmeireles@ifsc.usp.br

Desde que foi introduzido há mais de 10 anos, o modelo de Kitaev(1) tem sido um importante objeto de pesquisa, dada a sua grande riqueza de propriedades físicas não triviais, com aplicações que vão da computação quântica à supercondutividade. Dentre a miríade de características intrigantes que este modelo apresenta, uma posição de destaque se dá às fases de líquidos de spin encontradas no seu ground state, sendo este um raro exemplo de um modelo exatamente solúvel que apresenta tal fase da matéria. Como mostrado por Kitaev, a solução do modelo é dada em termos da fracionalização dos graus de liberdade de spin em termos de férmions de Majorana na presença de fluxos Z_2 . Embora este modelo tenha sido introduzido de maneira artificial, recentes investigações experimentais têm indicado a possibilidade da realização do líquido de spin de Kitaev na rede Honeycomb. Dentre os vários candidatos, o $H_3LiIr_2O_6$ tem um papel de destaque, visto que é o primeiro a apresentar ausência de ordem magnética até temperaturas muito baixas, o que é essencial na caracterização de uma fase de líquido de spin, e assim sendo possivelmente o primeiro material a exibir a fase de Kitaev pura.(2) Contudo, os resultados experimentais exibem um comportamento termodinâmico anômalo quando comparado com o modelo de Kitaev puro, o que pode ser ocasionado pela presença de desordem no sistema, como apontado por estudos recentes.(3) Assim, o objetivo deste projeto de mestrado é investigar o modelo de Kitaev na rede Honeycomb na presença de desordem, onde consideraremos a fase de líquido de spin topológica que surge na presença de um campo magnético externo fraco. Aqui a origem desta fase topológica se dá pela quebra da simetria de reversão temporal, que nos permite definir um índice topológico, de maneira semelhante ao que ocorre com isolantes de Chern. Por meio de técnicas numéricas de diagonalização exata, levaremos em conta desordem nos acoplamentos entre os spins, assim como a diluição de sítios, ou a introdução de vacâncias. Nisso buscaremos obter um entendimento mais profundo da natureza da desordem neste sistema, a fim de comparar com os resultados já conhecidos na literatura. Por fim, focaremos também nos efeitos que a desordem provoca nos índices topológicos, o que foi pouco explorado na literatura até então.

Referências:

- 1 KITAEV, A. Anyons in an exactly solved model and beyond. **Annals of Physics** , v. 321, n. 1, p. 2, 2006.
- 2 KITAGAWA, K. *et al* . A spin-orbital-entangled quantum liquid on a honeycomb lattice. **Nature** , v. 554, p. 341, 2018. DOI: 10.1038/nature25482
- 3 KNOLLE, J.; MOESSNER, R.; PERKINS, N. B. Bond-disordered spin liquid and the honeycomb iridate $H_3LiIr_2O_6$: abundant low-energy density of states from random majorana hopping. **Physical Review Letters** , v. 122, n. 4, p. 047202, 2019.

PG149

Energia de vácuo na cosmologia moderna

OLIVEIRA, E. A. B.

eduardo.amancio.oliveira@usp.br

Os últimos 20 anos testemunharam um avanço sem precedentes em nosso entendimento do universo em larga escala, sobretudo graças ao desenvolvimento de técnicas e tecnologias de observação cada vez mais precisas que permitiram que parâmetros cosmológicos fossem determinados com imprecisão de apenas alguns pontos percentuais. Isso permitiu a descoberta de uma forma de “energia escura” que vem dominando a atual expansão do universo – tornando-a acelerada – e de indícios que um período inflacionário de expansão teria ocorrido nos primórdios da história do universo – dando origem às anisotropias da radiação cósmica de fundo (RCF). O modelo cosmológico padrão, usualmente denominado *modelo Λ CDM*, tem apresentado enorme sucesso na descrição dos dados cosmológicos conhecidos a partir de pouquíssimos ingredientes fundamentais (como as densidades médias de energia de matéria fria e radiação, e o parâmetro de expansão de Hubble, H). Todavia, ele apresenta problemas fundamentais em aberto, a começar pelo fato de que a densidade de energia diretamente observável no universo é muito inferior àquela inferida gravitacionalmente pela Relatividade Geral – em particular, na escala cosmológica, se faz necessário introduzir uma “energia escura” para explicar a expansão acelerada do universo atual, bem como a ocorrência um período inflacionário primordial. Para que essa energia escura possa explicar a dinâmica de expansão acelerada em ambas essas fases, em concordância satisfatória com os dados cosmológicos, é necessário que ela apresente características muito peculiares: ela deve estar distribuída de maneira extremamente homogênea no universo (isto é, sem formar estruturas), e apresentar pressões extremamente negativas, de magnitude comparável à sua densidade de energia. Surpreendentemente, é possível codificar essa energia de uma forma extremamente simples, a partir da chamada constante cosmológica Λ . Ademais, suas características acima descritas (que são extremamente exóticas quando comparadas com a maior parte dos sistemas físicos conhecidos) também aparecem “naturalmente” em outro lugar: a energia de vácuo de teorias quânticas de campos. Valores negativos de densidade de energia e pressão aparecem usualmente no procedimento de renormalização de valores médios no estado de vácuo de campos quânticos. Desse modo, o presente projeto tem como objetivo analisar os cenários cosmológicos em que a energia de vácuo pode desempenhar um papel importante. Para tal, está sendo realizado um estudo detalhado do formalismo clássico e da quantização de campos livres em espaços curvos(1), para possibilitar uma análise do tensor energia-momentum desses campos, e uma compreensão dos seus efeitos em diferentes cenários inflacionários (2); em particular, pretende-se analisar em detalhes seu procedimento de renormalização, a partir do qual a constante Λ emerge “naturalmente”.

Referências:

1 BIRRELL, N. D.; DAVIES, P. C. W. **Quantum field theory in curved space** . Cambridge: Cambridge University Press, 1982. 2 LINDE, A. D. **Particle physics and inflationary cosmology** . Chur: Harwood Academic Publishers, 1990

PG150

Tuning the feshbach resonances in a mixture of sodium and potassium: the implementation for ^{39}K

MAZO, P. ; FARIAS, K. M. ; GUTIERREZ, E. D. M. ; SALCEDO, E. G. I. ; OLIVEIRA, G. A. D. ; CASTILHO, P. C. M. ; BAGNATO, V. S.

pedrolmazo@gmail.com

The objective of our global project is to produce a Bose-Einstein Condensate (BEC) of two bosonic species (^{23}Na and ^{39}K) with the possibility to vary the interspecies interaction for the study of the superfluids aspects in different regimes. Through the use of techniques as Stirring Beam and Feshbach Resonances (1) will be possible the study of the nucleation of vortices in a two species BEC with tunable interactions, exploring the different miscibility regimes between Na and K, as well as formation and studies in Quantum Turbulence. In this work we focus on implementing the Feshbach Resonances technique (1) in our system using the same pair of coils used in the magneto optical trap and magnetic trap. We have prepared a ultracold cloud of potassium using the technique of Gray Molasses and transferred it to a pure optical trap where the measurement takes place. Then the coil system is switched from an Anti-Helmholtz configuration to Helmholtz through an H-bridge (2) and becomes capable of generate a uniform field up to 800G. By performing loss spectroscopy we have observed at least two Feshbach resonances for ^{39}K . In this presentation we will discuss those measurements as well as the next steps of our work.

Referências:

1 CHIN, C, *et al* . Feshbach resonances in ultracold gases. **Reviews of Modern Physics** , v. 82, n. 2 , 1225, 2010. 2 CABRERA, C. R. *et al* . Quantum liquid droplets in a mixture of Bose-Einstein condensates. **Science** , v. 359, n. 6373, p. 301-304, 2018.

PG151

Do brasileiro a polarização: usando geometria para revelar estruturas em grafos direcionados

RESENDE, B. M. F. D. ; COSTA, L. D. F.

messias.physics@gmail.com

Na sociedade e na natureza sistemas geralmente são compostos por elementos que interagem por meio de relações assimétricas com feedbacks positivos ou negativos. Tais sistemas são comumente modelados usando estruturas de dados conhecidas como grafos direcionados com sinais. Portanto, é importante questionar o quão robusta é uma rede direcionada devido a modificações na sua direcionalidade? Por exemplo, apenas a modificação de uma única aresta pode modificar uma hierarquia em uma rede social, ocasionar a dessincronização de neurônios ou alterar a propagação de uma doença. No presente trabalho discutiremos como o uso de ferramentas desenvolvidas no contexto de geometria diferencial(2) e matéria condensada(1) pode ser usado para responder a essa questão. Também abordaremos as motivações históricas/econômicas para o estudo do problema de ranqueamento em grafos direcionados. Tais motivações vão desde o problema de determinar a melhor representação política, ranquear jogadores de xadrez e times de futebol em campeonatos difusos e identificar comportamento anômalo em redes sociais.(3)

Referências:

1 RESENDE, B. M. F.; COSTA, L. F. Characterization and comparison of large directed networks through the spectra of the magnetic Laplacian. *Chaos*, v. 30, n. 7, p. 073141, 2020. DOI: 10.1063/5.0006891. 2 AYRES, J. E. A. **Teoria de HodgeRank aplicada aos dados históricos do Campeonato Brasileiro de Futebol**. 2016. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2016. 3 VIGNA, S. **Spectral ranking**. 2019. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/0912.0238>. Acesso em: 12 ago. 2020.

PG152

Molecular recognition at septin interfaces: the switches hold the key

LEONARDO, D. ; BROGNARA, G. ; BRANDÃO-NETO, J. ; PEREIRA, H. D. ; ARAUJO, A. P. ; GARRATT, R. C.

The assembly of a septin filament requires that homologous monomers must distinguish between one another in establishing appropriate interfaces with their neighbors. To understand this phenomenon at the molecular level, we present the first four crystal structures of heterodimeric septin complexes. We describe in detail the two distinct types of G-interface present within the octameric particles which must polymerize to form filaments. These are formed between SEPT2 and SEPT6 and between SEPT7 and SEPT3, and their description permits an understanding of the structural basis for the selectivity necessary for correct filament assembly. By replacing SEPT6 by SEPT8 or SEPT11, it is possible to rationalize *Kinoshita's postulate* (1) which predicts the exchangeability of septins from within a subgroup. Switches I and II, which in classical small GTPases provide a mechanism for nucleotide-dependent conformational change, have been repurposed in septins to play a fundamental role in molecular recognition. Specifically, it is switch I which holds the key to discriminating between the two different G-interfaces. Moreover, residues which are characteristic for a given subgroup play subtle, but pivotal, roles in guaranteeing that the correct interfaces are formed.

Referências:

1 KINOSHITA, M. Assembly of mammalian septins. *Journal of Biochemistry* , v. 134, p.491–496, 2003. DOI: 10.1093/jb/mvg182.

PG153

Busca de padrões e aleatoriedades em criptografia usando sistemas dinâmicos

BISPO JUNIOR, A. G. ; BRUNO, O. M.

altamir.bispo@usp.br

Sistemas dinâmicos determinísticos (SDD) têm sido aplicados com sucesso, em substituição aos processos estocásticos. Um exemplo de aplicação bem-sucedida são os geradores de números pseudo-aleatórios. (1) Passo adiante, alternativas de criptografia com o emprego de SDD estão sendo ativamente pesquisadas. (2) Aplicações em criptografia requerem considerações adicionais de confiabilidade e de segurança, considerações estas que são obtidas mediante criptanálise. A literatura sobre aplicação de SDD em criptografia aponta a carência de estudos criptanalíticos nessa direção e disserta que o uso de parâmetros de entrada dos SDD no papel de chaves de criptografia pode expor o sistema criptográfico a fragilidades, uma vez que o “efeito borboleta” possui a propriedade de, através de pequenas alterações nos valores desses parâmetros, alternar de uma órbita estatisticamente indistinguível daquele produto de uma fonte com entropia máxima para outra órbita que seja uma mistura de padrões e aleatoriedades. (3) Ataques criptográficos naturalmente tirariam proveito de tais padrões, conseguinte pondo em risco a segurança de sistemas computacionais que dependam de tal criptografia. Ainda, como os sistemas computacionais existentes são limitados por uma precisão aritmética finita, há outras considerações importantes de ordem prática. Este trabalho de doutorado propõe apresentar novas evidências científicas a partir da criptanálise, por sua vez expandindo-se o conhecimento a respeito da evolução e do comportamento aperiódico de longo prazo para SDD e as consequentes fraquezas em aplicações de criptografia.

Referências:

1 WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. **Reviews of Modern Physics** , v. 55, n. 3, p. 601, 1983. 2 BAPTISTA, M. S. Cryptography with chaos. **Physics Letters A** , v. 240, n. 1-2, p. 50; 1998. 3 ALVARÉZ, G.; LI, S. Some basic cryptographic requirements for chaos-based cryptosystems. **International Journal of Bifurcation and Chaos** , v. 16, n. 8, p. 2129, 2006.

PG154

Modelo experimental de descontaminação de rins para transplante

GOENAGA, L. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. M. ; KURACHI, C. ; BAGNATO, V. S.

lgoenagamafud@ifsc.usp.br

Atualmente, os percentuais de pedidos anuais de transplantes de órgãos estão aumentando e o Brasil não é exceção. Em 2018, a taxa de transplante foi de 2,4% abaixo de 2017, que foi de 16,6 transplantes por milhão de população (pmp). Além disso, os dados fornecidos pela Organ Procurement Organization e Rede de Transplantes afirmam um total de 120.000 pessoas na lista de espera de órgãos (1), um resultado preocupante e desproporcional entre a demanda de órgãos para transplante e o número de transplantes realizados. Uma das causas desse problema é a contaminação de órgãos por patógenos que muitas vezes são resistentes (2) a antibióticos e não podem ser usados para doação. O objetivo do trabalho é projetar um modelo experimental para descontaminação de rins para transplante em humanos. Para realizar esta pesquisa, um modelo experimental de descontaminação de órgãos é proposto através do uso de técnicas ópticas, incluindo o uso de luz ultravioleta (UV), associadas à perfusão de rins humanos de descarte (não viáveis para transplante humano) **ex vivo**. A perfusão é realizada a partir de uma adaptação de um sistema comercial de manutenção da viabilidade de rins durante transplantes a um sistema de descontaminação por perfusão que foi desenvolvido em nosso grupo, já testado em pulmões para transplante humano com sucesso. (3) Feita a adaptação, foi avaliada a capacidade de descontaminação no modelo planejado com rim de descarte **ex vivo**. Até o momento é possível reduzir a carga microbiana no líquido circulante, de modo que talvez tornaram viáveis o órgãos que seriam descartados para possivelmente utilização em transplantes humanos.

Referências:

- 1 ABTO. Associação Brasileira de Transplante de Órgãos. Registro Brasileiro de Transplantes (RBT). **Dimensionamento dos transplantes no Brasil e em cada estado (2011-2018)**. São Paulo: ABTO, 2018. 94 p.
- 2 O'NEILL, J. **Antimicrobial resistance**: tackling a crisis for the health and wealth of nations. 2014. Disponível em: https://amr-review.org/sites/default/files/AMR%20Review%20Paper%20-%20Tackling%20a%20crisis%20for%20the%20health%20and%20wealth%20of%20nations_1.pdf. Acesso em: 23 set. 2020.
- 3 GALASSO, M. *et al*. Inactivating hepatitis C virus in donor lungs using light therapies during normothermic ex vivo lung perfusion. **Nature Communications**, v. 10, 2019. DOI: 10.1038/s41467-018-08261-z

PG155

Band gaps beyond Anderson rule and imbalance of interlayer charge carrier transfer in van der Waals heterostructures of transition metal dichalcogenides

BESSE, R. ; SILVEIRA, J. F. R. V. ; WEST, D. ; ZHANG, S. ; SILVA, J. L. F. D.

rafael.besse@usp.br

With the expanding knowledge of two-dimensional materials, the fabrication of van der Waals (vdW) heterostructures through the vertical stacking of different monolayer materials (1) has been proposed as a platform to design materials for several applications, such as photovoltaics and electrocatalysis. (2) However, despite being dominated by weak vdW interactions, interlayer coupling can play an important role in the properties of the vdW heterostructures, and the understanding of this aspect still needs to be improved. In particular, key parameters to design semiconductor heterojunctions are the band alignments and resulting band gaps, and also the mechanisms of interlayer charge transfer that occur after electron excitations in these systems. To shed light into these questions we performed a density functional theory (DFT) investigation of vdW heterobilayers formed of 6 transition metal dichalcogenides monolayers (MQ_2 ; M = Mo, Ni, Pt; Q = S, Se). (3) We employed the Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) to calculate the electronic band structures, and the interlayer charge transfer was studied with the Time-dependent DFT formalism combined with molecular dynamics, as implemented in the Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms (SIESTA) code. We found that for 8 heterobilayers the band gaps can be obtained through the Anderson Rule within a 0.10 eV accuracy, whereas the remaining systems have their band gaps increased or decreased by up to 0.28 eV from Anderson rule values, and we identified two important mechanisms that cause these variations. In one, interfacial hybridizations of electronic states in the valence band create electronic states with higher energy than the original top valence band of isolated monolayers, thus leading to a decrease in the band gap. This effect is more pronounced in junctions that have Ni or Pt in both layers, in which a large number of bands are involved in the interactions, whereas in junctions that contain Mo the effect can be traced mainly to the interactions between $\text{Mo-}d_{z^2} + \text{Q-}p_z$ states in MoQ_2 and $\text{Q-}p_z$ states in $(\text{Ni,Pt})\text{Q}_2$. The other effect is responsible for increasing the band gap, and occurs in heterojunctions with type-II band alignment, for which an electric dipole due to the formation of the interface leads to a relative shift of band energies between the two layers. The monolayer band offsets of the $\text{MoS}_2/\text{PtSe}_2$ heterojunction suggest the formation of a type-I junction, with both valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM) located at PtSe_2 , but upon the formation of the heterobilayer, a shared VBM state is created. A photoexcitation involving the VBM and CBM of MoS_2 is expected to cause holes and electrons to transfer to lower energy states in PtSe_2 . Our results show that electron transfer occurs at a faster rate than hole transfer, which is explained by the stronger coupling of conduction band states compared to valence band, due to a smaller energy difference. Furthermore, electron transfer is secondarily enhanced by a level crossing induced by the interfacial dipole that originates from the imbalance in charge carriers transfer.

Referências:

1 GEIM, A. K.; GRIGORIEVA, I. V. Van der Waals heterostructures. **Nature**, v. 499, n. 7459, p. 419-425, 2013. 2 LI, C. Engineering graphene and TMDs based van der Waals heterostructures for photovoltaic and photoelectrochemical solar energy conversion. **Chemical Society Reviews**, v. 47,

n. 13, p. 4981-5037, 2018. 3 BESSE, R.; LIMA, M. P.; DA SILVA, J. L. F. First-principles exploration of two-dimensional transition metal dichalcogenides based on Fe, Co, Ni, and Cu groups and their van der Waals heterostructures. **ACS Applied Energy Materials** , v. 2, n. 12, p. 8491-8501, 2019.

PG156

Simulando observações de matéria escura no centro galáctico com observatórios atuais e futuros

FORTES, G. ; VIANA, A.

guilherme.fortes@usp.br

Durante o século vinte, ficou cada vez mais evidente que galáxias e aglomerados de galáxias têm mais massa que é observável. (1) Uma partícula chamada de Matéria Escura (ME) foi teorizada para explicar essa divergência. Esse trabalho tem como objetivo avaliar a performance de telescópios de Cherenkhov existentes e futuros, aplicadas a busca por sinais dessa partícula, em especial no Centro Galáctico. O desempenho de observatórios como HESS e CTA foi simulado a partir de seus IRFs (Instrument Response function) e dados estatísticos da observação de raios gama cuja fonte seria um subproduto do processo de aniquilação da ME no halo Galáctico. Um perfil Einasto de distribuição de densidade de ME na Via-Láctea foi considerado. O método de teste de hipóteses, a razão da função de verossimilhança (2) para processos de contagem, foi empregado a fim de averiguar a significância dos possíveis sinais a serem observados e qual seção de choque a partícula deveria apresentar para uma detecção desambígua. A análise foi feita para o caso genérico de uma partícula de ME do tipo WIMP (Weakly Interacting Massive Particle), e para o caso específico do modelo de Secluded Dark Matter.(3) Gráficos de seção de choque, que indicam zonas de exclusão, para várias massas e canais de aniquilação de ME foram gerados. Neles, mostramos que os atuais telescópios considerados ainda não são capazes de observações de ME com seções de choque inferiores a $3 \times 10^{-26} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$, que é o valor canônico da seção de choque que uma partícula de ME que foi gerada térmicamente no Universo primordial deve ter para explicar a densidade de relíquia observada atualmente. No entanto, o observatório CTA planejado pode ter sensibilidade que permita ultrapassar esse marco e contribuir em restringir o espaço de busca e parâmetros de modelos.

Referências:

1 CLOWE, D. *et al* . A direct empirical proof of the existence of dark matter. **Astrophysical Journal** , v. 648, n. 2, p. L109–L113, 2006. DOI: 10.1086%2F508162.1 2 LI, T-P.; MA, Y. Q. Analysis methods for results in gamma-ray astronomy. **Astrophysical Journal** , v. 272, p. 317–324, 1983. DOI: 10.1086/161295. 3 PROFUMO, S. *et al* . Searching for secluded dark matter with H.E.S.S., Fermi-LAT, and Planck. **Journal of Cosmology and Astroparticle Physics** , 2018. DOI: 10.1088/1475-7516/2018/03/010.

PG157

Epidemic modeling with adaptive mobile agents

VENTURA, P. C. ; MORENO, Y. ; RODRIGUES, F. A.

paulo.pc.vs@gmail.com

Despite latest advances in epidemic modeling, there is still a major demand for ways to incorporate behavioral responses to the spread of a disease, such as social distancing and prevention methods. Besides that, synthetic models for human mobility could replace real mobility data when the latter is unavailable, but more study is required in this topic. We propose a model for epidemic spreading in a population of mobile agents (1) that incorporates local behavioral responses. The baseline mobility model is a two-dimensional random walk, while the epidemic model is a basic SIS (Susceptible-Infectious-Susceptible). Based on adaptive network models (2), we allow susceptibles to deviate their random walk by moving away from infectious agents in their neighborhood. We study the basic phenomenology of the model under different regimes regarding the population density and the time scale of the epidemics, showing how our model deviates from the basic random walk and the homogeneously mixed case. We pay special attention to the regime in which the epidemics is much slower than the mobility, for which we develop a simple semi-analytic approach: we extract the rate of infectious contacts from simulations with frozen epidemic dynamics, then apply this quantity into an SIS dynamical equation. We determine the bifurcations of the model, showing that a bistable phase is present for intermediate values of the infection probability and sufficiently high density of agents. Yet under the slow epidemics regime, we describe some features of the underlying network of instantaneous contacts between agents, showing that the bistability is related to a spontaneous emergence of susceptible clusters during the transient stage of epidemic evolution. From a theoretical perspective, our work merges the well-known phenomenology of epidemics on adaptive networks with that of mobile agents, proposing a novel way to describe epidemic behavioral responses along with human mobility. Although the model, as proposed, is not aimed at real situations, it can be further developed and validated to represent diseases with visible symptoms, as well as the contagion rate in crowds that move within limited spaces.

Referências:

1 FRASCA, M. *et al* . Dynamical network model of infective mobile agents. **Physical Review E** , v. 74, n. 3, p. 036110, 2006. 2 GROSS, T.; D'LIMA, C. D.; BLASIUS, B. Epidemic dynamics on an adaptive network. **Physical Review Letters** , v. 96, n. 20, p. 208701, 2006.

PG158

Optimization of Landau Gauge Fixing for SU(3) on the Lattice

LEAL JUNIOR, J. M. ; CERQUEIRA, M. C. ; MENDES, T. C. D. R.

jesuel.leal@usp.br

Quantum Field Theory (QFT) is the widely used framework for stating and studying the fundamental laws of particle physics. In QFT one aims at describing the interactions between the fields associated with different particles of a theory, encoded in the lagrangian of the system, and its emergent phenomena. One example of such a theory is QCD, the theory of strong interactions between quarks and gluons, which has a SU(3) symmetry at the level of its lagrangian. One of the tools to study non-abelian field theories at low-energies, where perturbative methods fail, is lattice field theory, for which one introduces a lattice in a 4-dimensional euclidean space. (1) The main objects of study in QFTs are the Green's Functions, specially the two-point functions, also called propagators. Investigations of propagators of gauge fields on the lattice have become the specialty of our group at IFSC-USP and one hopes to obtain an understanding of the confinement problem in QCD from the behavior at low energies of these functions. In order to calculate the gauge-dependent propagators, one has to apply a gauge fixing procedure, which on the lattice takes the form of particular algorithms. The optimization of these algorithms, specially for Landau gauge, are well studied for the gauge group SU(2). (2) For the SU(3) symmetry group, however, apparently no thorough study of optimization exists, and the articles on this topic are satisfied with describing "get by" procedures. (3) Here we present preliminary results of our optimization analysis for Landau Gauge Fixing algorithms in SU(3).

Referências:

1 GATTRINGER, C.; LANG, C. B. **Quantum chromodynamics on the lattice** . Berlin: Springer, 2010. (Lecture notes in physics, v. 788) 2 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Critical slowing down in SU(2) Landau gauge fixing algorithms at beta = infinity. **Computer Physics Communications** , v. 154, p. 1–48, 2003. DOI: 10.1016/S0010-4655(03)00279-0. 3 SUMAN, H.; SCHILLING, K. A comparative study of gauge fixing procedures on the connection machines CM2 and CM5. **Paralell Computing** , v. 20, n. 7, p. 975-990, 1994.

PG159

Immobilization of photosensitizers at a polymeric materials and pre-clinical studies

ZANGIROLAMI, A. ; BAGNATO, V. S. ; BLANCO, K. C.

zangirolami.amanda@gmail.com

The research project approaches the biophotonic area applied using photodynamic inactivation to decontaminate endotracheal tubes (ET) using curcumin as a photosensitizer and an irradiation at blue light. The Mechanical Ventilator Associated Pneumonia is a serious infection at the hospital area and can occur when the ET is installed into the patient who has undergone some type of trauma or surgery and cannot breathe without external help. (1) The ET is introduced at the patient's trachea (2) and can remain for a maximum of 7 days. The infection is caused by the development of a biofilm at the tube's wall and *Staphylococcus aureus* is the mainly microorganism which cause this infection and is developed between 48-72h after the introduction of the tube. However, another species, like *Pseudomonas aeruginosa*, can be at the tube. Curcumin is a natural pigment and it had been chosen because is approved by the FDA. (3) The tube is positioned at the trachea, so the molecule with photodynamic action cannot be toxic for the patient's cells and be toxic to the microorganisms. An immobilized ET was developed in the master's end, where a chemical reaction between the curcumin and the polymeric material of the tube was performed. The characterizations needed in this new material were made to prove the presence and the bond between the tube and the curcumin. FTIR, Raman Microscopy, Confocal Fluorescence Microscope, Scanning Electron Microscopy, UV visible spectroscopy, fluorescence lifetime, Contact Angle were an analysis to prove the presence of the curcumin at the ET. In vitro tests were made to show the toxicity of the *S. aureus*, *Escherichia coli*, *P. aeruginosa*, and *Klebsiella pneumoniae* biofilm in the immobilized tube, showing satisfactory results. Multi-species of biofilms were tested in vitro with the functionalized tubes and show satisfactory results in microbial inactivation. Besides, we made the tension test to test the flexibility of the new material, physical-chemical characterizations with different pHs and these tubes were tested with UV-visible and colour changed in the surface of the tube. Toxicological tests performed with HDFn (Human dermal fibroblasts – neonatal) were in progress and preliminary tests demonstrate that functionalized tubes aren't toxic to the cell. Stability tests were being performed to study the curcumin in the tube. Temperature, pH, light are the parameters which have been chosen for study along 6 months. The next step we have already started is to build a system to mimic the intubation on a human system in the ICU contain a contamination system, the functionalized tube and an optical fiber with a low blue intensity which was built in our lab to not generate heat inside the patient and avoid damage on patient's healthy cells. The test will approach the study of the real life and lead the study to the next pre clinical tests.

Referências:

1 HASHEMI, M.M. *et al* . Preclinical testing of a broad-spectrum antimicrobial endotracheal tube coated with an innate immune synthetic mimic. **Journal of Antimicrobial Chemotherapy** , v. 73, n. 1, p. 143–150, 2018. 2 REID, G. Biofilms in infectious disease and on medical devices. **International Journal of Antimicrobial Agents** , v. 11, n. 3–4, p. 223–226, 1999. 3 NELSON, K. M. *et al* . The essential medicinal chemistry of curcumin. **Journal of Medicinal Chemistry** , v. 60, n. 5, p. 1620–1637, 2017.

PG160

Towards a technical thermodynamics of an inhomogeneous gas of ultracold Bosonic atoms

HEMMERLING, M. ; MIOTTI, M. ; ROMERO-ROCHÍN, V. ; BAGNATO, V. S.

Non-uniform systems are widely common in nature and yet physicists can barely describe them in a simple and effective way. Specially in the field of ultracold atomic gases, it is already possible to trap atoms in box-like potentials (1), but many laboratories around the world (including the São Carlos laboratory) still have the early-invented harmonic-potential traps, which induce an inhomogeneous density profile in their trapped samples. Consequently, the thermodynamic analysis of a harmonically confined gas is much more challenging and difficult. Nonetheless, Romero and Bagnato (2-3) shown that a gas in harmonic potential has a pair of conjugate variables equivalent to pressure and volume in a homogeneous gas. Those conjugate variables can be easily measured with the standard tools to probe trapped samples, making possible a reliable thermodynamic study of an inhomogeneous gas. On that account, we started a long-term project about two years ago to set up a technical thermodynamics for ultracold Bose gases, in the spurity of technical tables used in industrial engineering. Our goal is to evaluate experimentally the equation of state of the harmonically trapped, ultracold rubidium-87 gas using the Romero-Bagnato formalism, in order to create a set of technical coefficients that will allow one to calculate the thermodynamic properties of refered gas in many different conditions, which might be impactful specially for the rising field of quantum thermal engines. In the present, we are analyzing our experimental data, which have been collected after several months of measurements. The details of our data and their analysis will be presented in the poster and throughly discussed in the video.

Referências:

1 GAUNT, A. L. *et al* . Bose-Einstein condensation of atoms in a uniform potential. **Physical Review Letters** , v. 110, n. 20, p. 200406, 2013. 2 ROMERO-ROCHÍN, V. Equation of state of an interacting Bose gas confined by a harmonic trap: The role of the "harmonic" pressure. **Physical Review Letters** , v. 94, n. 13, p. 130601, 2005. 3 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.

PG161

Study of a water-soluble high molecular weight chitosan on Langmuir monolayers

JOHELAVICIUS, K. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

karen.jochelavicius@usp.br

Langmuir monolayers containing lipids are used as a membrane mimetic system, simulating half of a biological membrane. They are mostly applied when there is interest in assessing events that occur at the membrane level, such as the interaction between lipids and drugs, proteins, peptides, among other biomolecules. (1) In this work, we analyze the interaction between lipids that typically compose mammalian or bacterial cell membranes and chitosan. The natural polysaccharide chitosan is known for its antimicrobial, anti-tumor, wound healing and fat binder properties, but its use is limited due to poor solubility in non-acidic media. Here, we use a newly synthesized high molecular weight chitosan with degree of acetylation (DA) of 35% (Ch35%), that solubilizes in physiological pH of 7.4, overcoming this limitation. (2) Monolayers containing pure zwitterionic lipids dipalmitoyl phosphatidyl choline (DPPC) and dipalmitoyl phosphatidyl ethalonamine (DPPE), the anionic dipalmitoyl phosphatidyl glycerol (DPPG), or a lipid extract from *Escherichia coli* were deposited onto subphases with pHs 4.5 and 7.4, with different concentrations of Ch35%: 0, 10⁻⁵, 10⁻³ and 10⁻¹ mg/mL. The incorporation of chitosan caused monolayer expansion, and reduced the compressional modulus in some cases, while it increased in others. In general, monolayers suffered decrease in the rigidity, but highly fluid monolayers suffered a small increase. Surprisingly, the effects from Ch35% were smaller in a more realistic model of a bacterial membrane (the *E. coli* lipids monolayer) than in a model system for mammalian membranes (3) (the mixture DPPC-SM-Chol (1:1:1), forming rafts). That was unexpected owing to the polycationic character of the chitosan, and the presence of negatively charged lipids in bacterial but not in mammalian membranes. This result indicates that a careful study needs to be conducted to apply chitosan as an antibacterial agent in living organisms. Even though they are biocompatible, chitosans may have significant effects on healthy cell membranes.

Referências:

- 1 NOBRE, T. M. *et al* . Interactions of bioactive molecules nanomaterials with Langmuir monolayers as cell membrane models. **Thin Solid Films** , v. 593, p. 158–188, 2015. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.09.047.
- 2 FIAMINGO, A.; CAMPANA FILHO, S. P.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. **Tuning the properties of high molecular weight chitosans to develop full water solubility within a wide pH range.** p. 1–10, 2020. DOI: 10.26434/chemrxiv.11854293.v1.
- 3 PEREIRA, A. R. *et al* . Enhanced chitosan effects on cell membrane models made with lipid raft monolayers. **Colloids and Surfaces B : biointerfaces**, v. 193, 2020. DOI: 10.1016/j.colsurfb.2020.111017.

PG162

Estratégias em modelagem molecular e avaliação biológica para uma série de candidatos à fármacos para a leishmaniose

TELES, H. ; ANDRICOPULO, A. D.

henrique.teles@ifsc.usp.br

A Leishmaniose, de acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS)(1), é uma doença tropical negligenciada (DTN) causada por mais de vinte espécies do gênero do protozoário *Leishmania* e são transmitidos aos seres humanos através das picadas dos flebotomos *Phlebotomus* e *Lutzomyia*. No mundo, mais de 1 bilhão de pessoas vivem em região endêmica da doença correndo o risco de de infecção. Atualmente, cerca de 0,9 a 1,6 milhão de pessoas são infectadas por ano, e sendo reportadas de 20.000 a 30.000 mortes por ano em decorrência a esta doença. A Leishmaniose Visceral é a forma mais agressiva podendo levar ao óbito em casos de não tratamento. A doença atinge órgãos viscerais como fígado, baço, linfonodos e medula óssea. O Brasil é responsável por mais de 90% dos casos de Leishmaniose Visceral em todo continente americano. Diante desses dados e do tratamento disponível ser bastante limitado devido a longa duração e alta toxicidade o desenvolvimento de novos fármacos para a leishmaniose visceral é de grande importância. Neste trabalho de mestrado, uma das metodologias aplicadas consiste no "planejamento de fármaco baseado no ligante" (LBDD- Ligand Based Drug Design). Nesta estratégia a principal ferramenta são os métodos estatísticos capazes de relacionar a estrutura de uma molécula com uma quantidade de interesse (resposta), por exemplo atividade, QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship), ou propriedade, QSPR (Quantitative Structure–Property Relationship). O conjunto de moléculas utilizado neste trabalho consiste em uma série de 63 oxadiazóis ativos e 2 oxazóis contra *L. infantum*. A potência destes compostos é expressa como a concentração necessária para inibir em 50% o crescimento do parasita (IC₅₀) obtido a partir de ensaios fenotípicos. Esse conjunto de molécula foi submetido ao cálculo de sete fingerprints binários disponíveis pelo software Canvas.(2) Teste pilotos utilizando a ferramenta AutoQSAR (3), disponível pelo software Maestro, obtiveram as moléculas pertencentes ao conjunto treino e parâmetros estatísticos do modelo gerado. Para este teste piloto foram selecionados 52 moléculas para o treino, resultando em um modelo com parâmetros $R^2=0,7948$ e $Q^2=0,7099$. Visando aprimorar o modelo foi utilizado o método de agrupamento de dado hierárquico (Hierarchical clustering) agrupando moléculas semelhantes em dois grupos. Essa metodologia conduziu a melhores resultados estatísticos de $R^2=0,9045$, $Q^2=0,8831$ para o grupo 1 e $R^2=0,7584$, $Q^2=0,7455$ para o grupo 2. O domínio de aplicabilidade do modelo foi obtido através do gráfico de dispersão das entidades químicas. Além dos métodos 2D, será também utilizando o método de Análise Comparativa dos Campos Moleculares (CoMFA, na sigla em inglês para Comparative Molecular Field Analysis). Por fim, os modelos quimiométricos gerados serão utilizados na proposição de novas estruturas para síntese e avaliação biológica. O projeto será desenvolvido no Laboratório de Química Medicinal e Computacional (LQMC) do Instituto de Física de São Carlos (IFSC-USP). Este projeto está integralmente inserido no escopo do laboratório e irá contribuir para o avanço das nossas pesquisas em uma área que representa um grande problema de saúde pública no Brasil.

Referências:

1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Leishmaniasis** . Disponível em: <http://www.who.int/leishmaniasis/en/>. Acesso em: 25 set. 2020. 2 DUAN, J.; DIXON, S.L.; LOWRIE, J.F.; SHERMAN, W. Analysis and comparison of 2D fingerprints: insights into database scree-

ning performance using eight fingerprint methods. **Journal Molecular Graphics and Modelling** , v. 29, n.2, p.157-170,2010. 3 DIXON, S.L. *et al* . AutoQSAR: an automated machine learning tool for best-practice QSAR modeling, **Future Medicine Chemistry** , v. 8, n.15, p.1825-1839,2016.

PG163

Desenvolvimento e otimização de fotoanodos de BiVO₄ aplicados à fotossíntese artificial para produção de hidrogênio combustível

CORREA, A. D. S. ; GONÇALVES, R. V.

andressasanc@gmail.com

A fotossíntese artificial é uma metodologia cuja eficácia para geração de hidrogênio combustível tem sido experimentalmente comprovada e aprimorada desde sua descoberta por Fujishima Honda em 1972.(1) Essa metodologia consiste na utilização de um material semiconductor com características específicas, para o qual a luz solar fornece energia para o processo de quebra da molécula da água, gerando hidrogênio e oxigênio. O BiVO₄ é um semiconductor que possui características promissoras para a aplicação em reações fotossintéticas. São elas o band gap adequado (2,4 eV), uma vez que o mínimo seria 1,23 eV, além da fotocorrente teórica de 7,5 mA/cm².(2) Entretanto, o alcance desse valor ainda não foi atingido ou relatado na literatura, devido a defeitos estruturais e de transporte de cargas no material. Portanto, ainda há muitos aspectos a serem explorados para corrigir defeitos estruturais e assim melhorar o desempenho desse material como fotocatalisador, reduzindo a ocorrência de recombinação de cargas, seja no interior do fotoanodo ou na interface eletrodo-eletrólito.(3) Neste trabalho, propomos a produção e otimização de fotoeletrodos de BiVO₄, por meio do método dos precursores poliméricos e deposição por *spin coating*. Uma das principais vantagens dessa associação entre esses métodos é o baixo custo para produção dos fotoanodos pela independência de equipamentos mais complexos exigidos por métodos como o sputtering. Para produção da resina precursora de qualquer óxido por esta metodologia, são necessários compostos solúveis em água para prover os íons necessários, além de um agente complexante e um polimerizador, os quais são reagentes de baixo custo e fácil acesso. Nessa rota de síntese, após a complexação dos íons solúveis em água com o ácido cítrico, ocorre a formação de um polímero com adição de um agente polimerizante, geralmente etilenoglicol sob temperaturas acima de 100 °C, ocorrendo eliminação da parte orgânica do material precursor durante o tratamento térmico. No presente trabalho, foi realizado o estudo da influência da temperatura, espessura, taxa de aquecimento e tempo. O estudo da morfologia das superfícies dos filmes de BiVO₄ tratados a 450 °C, 500 °C, 550 °C e 600 °C por meio de análises MEV permitiu o estabelecimento de correlações entre o desempenho fotoeletroquímico dos fotoanodos e as alterações morfológicas observadas. Foram também realizadas análises de espectroscopia Raman e difração de raios-X, confirmando a obtenção unicamente da fase cristalina monoclinica, bem como permitindo inferir influência das alterações estruturais na intensidade das densidades de fotocorrente observadas para cada temperatura. Além disso, as estruturas eletrônicas dos filmes de BiVO₄ foram estudadas por espectroscopia de fotoelétrons de raios X (XPS), A presença dos íons Bi 3+ e V 5+ foi confirmada para as amostras tratadas a todas as temperaturas pelas análises de XPS, cujos espectros permitiram a identificação dos dubletos característicos dos orbitais 2p do vanádio e 4f do bismuto. O método dos precursores poliméricos mostrou-se um processo eficaz e reproduzível para a obtenção de filmes de BiVO₄ capazes de conduzir a divisão fotocatalítica de água, possibilitando a posterior formação de heterojunções com materiais com posicionamento de bandas favoráveis, otimizando o processo de fotossíntese.

Referências:

1 FUJISHIMA, A.; HONDA, K. Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode. **Na-**

ture , v. 238, p. 37–38, 1972. DOI10.1038/238037a0. 2 LI, H. *et al* . Z-Scheme photocatalytic systems for promoting photocatalytic performance: recent progress and future challenges. **Advanced Science** , v. 3, n.11, 2016.DOI 001.101002;advs .201500389. 3 COOPER, J.K. *et al* . Electronic structure of monoclinic BiVO₄. **Chemistry of Materials** , v. 26,n.18, p.5365–5373,2014.

PG164

Teoria de Yang-Mills-Higgs auto-dual modificada

MALAVAZZI, H. ; FERREIRA, L. A.

henrique.malavazzi@usp.br

Monopolos magnéticos são objetos fascinantes que permitem uma melhor compreensão das teorias de *gauge* não-abelianas. Dirac mostrou que a mecânica quântica é compatível com a existência destes objetos desde que a carga elétrica seja quantizada, estabelecendo uma relação de quantização.(1) Entretanto, a solução encontrada por ele, consiste de uma solução singular de monopolo magnético com energia divergente na teoria do eletromagnetismo, uma teoria de *gauge* abeliana associada ao grupo $U(1)$. Com o surgimento das teorias de *gauge* não-abelianas, 't Hooft e Polyakov, acoplando um campo de Higgs a um campo de Yang-Mills, encontraram uma solução de monopolo magnético, via quebra espontânea de simetria, não singular e com energia finita (2), preservando a condição de quantização estabelecida por Dirac, e associado ao grupo homotópico $\pi_2(M)$. A existência de um invariante topológico, conseqüente do grupo de homotopia, na teoria, garante um limitante inferior para energia do sistema, estabelecendo um mínimo absoluto. Desta forma torna-se possível a resolução do sistema físico usando equações diferenciais de primeira ordem que constituem o setor auto-dual.(3) Portanto, preservando a informação topológica, nós modificamos o setor auto-dual da teoria Yang-Mills-Higgs, o que nos possibilitou a construção de uma nova teoria invariante sob ação do grupo conforme, com um fator similar a uma permissividade magnética dependente da posição, implicando em novos comportamentos para as cargas magnéticas da teoria, especialmente no regime assintótico. Notamos que a teoria modificada possui uma liberdade que nos permite contruir novas soluções de monopolos escolhendo campos que satisfazem condições da carga topológica, assim, foi possível verificar a existência de monopolos esféricamente simétricos, auto-duais, equivalentes ao monopolo de 't Hooft-Polyakov sem a introdução de um potencial para o campo de Higgs. Além disso, a presença da simetria conforme na teoria, permitiu a construção de um novo *ansatz* com cargas magnéticas não-nulas, singulares, mas com energia finita.

Referências:

1 DIRAC, P. Quantised singularities in the electromagnetic field. **Proceedings of the Royal Society London A** , v. 133, n.821, p.60-72,1931. 2 HOOFT, G..Magnetic monopoles in unified gauge theories. **Nuclear Physics B** ,v.79, n.2, p. 276–284,1974. 3 FERREIRA, L. A.; SHNIR, Y. Exact self-dual skyrmions, **Physics Letters B** , v.772, p. 621=627,2017. DOI 10.1016/j.physletb.2017.07.040;

PG165

Glass and glass ceramics: structure study by advanced solid state NMR

SANTOS, M. L. D. ; ECKERT, H.

millena.santos@usp.br

Glasses have shown in the past two decades an extensive range of applications. In materials science a variety of combinations of different physical proprieties can be realized by varying composition and fabrication processes. In bioactive glass area new oxide glass formulation are being developed to tailor functional properties for specific biomedical applications. (1-2) The same applies to glass ceramics which are produced by controlled thermal treatment of precursor glasses. (3) In the present work, we explore how the speciation of group-13 elements (boron and aluminium) introduced into bioglasses is determined by the glass composition and how it relates to materials function and performance. Also, we try to gain further insight into the structural role of magnesium in glasses, which is of considerable interest in view of this element's ability to produce aluminoborosilicate glasses with enhanced crack initiation resistance. To understand and rationalize all these effects on a structural basis, we combine results from standard magic-angle spinning (MAS), multiple quantum -MAS and high resolution dipolar methods with physical property measurements in order to obtain new structure-function correlation.

Referências:

1 KATO, Y. *et al* . Effect of B₂O₃ content on crack initiation under Vickers indentation test, **Journal Ceramic Society Japan** , v.118,n.9, p.792–798,2010. 2 BAINO, F; HAMZEHLOU, S.; KARGOZAR, S., T. Bioactive glasses: where are we and where we going? **Journal Functional Biomaterials** ,v.9, n.1,p. 25,2018. 3 PFEIFER, M. Material proprieties and materials science. *In*: PFEIFER, M. **Materials enabled designs** .[*s.l* .]: Butterworth-Heinmann, 2009, chap.4, p.59–114.

PG166

Desenvolvimento de um microscópio óptico holográfico sem lentes

D'ALMEIDA, C. D. P. ; PRATAVIEIRA, S.

camila.paula.almeida@usp.br

O desenvolvimento do microscópio, fundamentado no uso de lentes, deu-se no século XVI. No entanto, as técnicas que envolvem a microscopia continuam em evolução, apresentando aplicações proveitosas para diferentes áreas de investigação. Com o avanço de sensores digitais de imagem, surgiu a possibilidade da criação de microscópios com a ausência de elementos ópticos de ampliação entre a amostra e o dispositivo de captura da imagem. Dentre as possibilidades de configurações existentes na microscopia sem lentes, algumas em especial surgiram com o propósito de simplificar a instrumentação usada para facilitar o acesso e uso desses sistemas. (1) Do uso dessa instrumentação sem lentes aplicado à microscopia holográfica, teve origem a técnica de microscopia holográfica digital sem lentes, a qual é aplicada neste trabalho de doutorado. Com uma instrumentação simplificada e o uso de processamentos digitais de imagens, esses microscópios são capazes de fazer imagens de amplitude e fase da amostra observada, com um campo de visão muito mais amplo que o oferecido pela microscopia óptica tradicional. (2) Para a montagem desse equipamento, é usada uma fonte de luz LED, cuja iluminação é filtrada espacialmente por uma pequena abertura circular, de modo a aumentar a coerência espacial da iluminação que incide sobre a amostra. Esta, por sua vez, é posicionada bem próximo ao sensor de imagem digital, que captura um padrão de intensidade correspondente à soma da iluminação que passou diretamente pela amostra, sem sofrer desvios, com a iluminação que interagiu com a amostra e, por isso, carrega consigo informação dela. A esse padrão é dado o nome de holograma. De modo a avaliar o desempenho de dois possíveis métodos para a construção de nosso microscópio, utilizamos para cada um deles um modo particular de obter e processar as imagens. Para o uso do método multiespectral, fizemos o uso de três fontes de luz com emissão em diferentes comprimentos de onda dentro do espectro visível e utilizamos uma imagem de cada comprimento de onda como entrada para o algoritmo de processamento. Enquanto o método multialturas envolveu a aquisição de uma sequência de hologramas em um só comprimento de onda, diferenciados por variações na distância entre a amostra e o sensor no momento da captura das imagens. Para esse último caso, seis imagens em diferentes alturas eram enviadas como entrada para o processamento. A análise dos resultados convergiu para a escolha do método multialturas em nosso sistema e, portanto, foram feitos aprimoramentos da estrutura e do software para atender os procedimentos escolhidos para aquisição e processamento das imagens. A estrutura, produzida com uma impressora 3D, foi desenvolvida para tornar o equipamento simples e portátil. E seu controle, tem sido elaborado para agilizar a aquisição das imagens e facilitar o uso do sistema. A linguagem escolhida para a escrita dos algoritmos de comando do sistema, é o Python, mesma linguagem em que temos implementado os algoritmos de processamento de imagens. Atualmente, contamos com uma instrumentação compacta, capaz de fazer imagens de amplitude e fase, com aproximadamente $30mm^2$ e resolução de $5\ \mu m$.

Referências:

1 OZCAN, A.; MCLEOD, E. Lensless imaging and sensing. **Annual Review of Biomedical Engineering**, v. 18, p. 77-102, 2016. 2 ISIKMAN, S. O. *et al*. Lensfree on-chip microscopy and tomography for biomedical applications. **Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, v.

18, n. 3, p. 1059-1072, 2012.

PG167

Correlações gluônicas em teorias de Gauge na rede a temperatura finita

CERQUEIRA, M. C. ; MENDES, T. C. D. R.

matheus.c.cerqueira@gmail.com

A cromodinâmica quântica (QCD) é a teoria de gauge que descreve as interações fortes através de um modelo de quarks, no qual estes interagem por troca dos campos dos glúons. Uma característica importante desta teoria é que ela apresenta comportamentos distintos quando se está em um regime de altas e baixas energias. Em especial, no limite de baixas energias, é observado que os quarks e glúons estão confinados em partículas chamadas de hádrons, através dos estados ligados de quarks. Uma das maneiras de estudar este comportamento é através de métodos não perturbativos, no qual utilizamos o da QCD na rede. Este método é um dos mais bem estabelecidos para se trabalhar com QCD em baixas energias, tornando-se uma ferramenta indispensável para melhor compreensão destes fenômenos e suas quantidades mensuráveis. Este trabalho utiliza de simulações numéricas com métodos de Monte Carlo para estudar os modelos de QCD na rede em $SU(2)$ e $SU(3)$, tendo como objetivo a análise da transição de fase a temperatura finita, utilizando o parâmetro de ordem da teoria (loop de Polyakov). (1) Este trabalho está utilizando apenas a implementação de um regime de puro gauge (ausência de quarks), estudando mais especificamente o propagador dos glúons utilizando a fixação de gauge de Landau em redes assimétricas (temperatura finita), para melhor compreensão no futuro do comportamento do propagador ao redor da temperatura crítica de transição tanto em $SU(2)$ quanto em $SU(3)$. (2) A fixação de gauge de Landau no $SU(2)$, assim como os propagadores do glúon, já foram obtidos. Neste momento, o trabalho encontra-se em estudo de análise de eficiência da fixação de gauge de Landau no $SU(3)$. (3)

Referências:

1 GATTRINGER, C.; LANG, C. **Quantum chromodynamics on the lattice** : an introductory presentation. Berlin: Springer, 2010. 343 p. (Lecture Notes in Physics, v. 788). 2 CUCCHIERI, A.; MAAS, A.; MENDES, T. Infrared properties of propagators in Landau-gauge pure Yang-Mills theory at finite temperature. **Physical Review D** , v. 75, n. 23, p. 076003-1-076003-23, 2007. 3 CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Critical slowing down in $SU(2)$ Landau gauge fixing algorithms at beta = infinity. **Computer Physics Communications** , v. 154, n. 1, p. 1-48, 2003.

PG168

Oscilações de Bloch de átomos de estrôncio ultra frios monitorados por meio de recuo atômico coletivo

RIVERO, D. ; COURTEILLE, P.

dalilarr@gmail.com

O projeto de pesquisa insere-se na construção e caracterização de um gravímetro atômico. Este interferômetro visa implementar Oscilações de Bloch na matéria ultra fria em uma cavidade anelar e um sistema de monitoramento não destrutivo baseado em Recuo Atômico Coletivo para descrever de forma contínua e precisa a força gravitacional. (1) O estrôncio é a espécie atômica que irá apresentar a dinâmica da interação dos átomos com os modos de luz da cavidade anelar, para que esse acoplamento ocorra os átomos precisam ser resfriados por diferentes técnicas sob seu limite de recuo. (2) Após atingir as baixas temperaturas, os átomos serão colocados dentro do modo da cavidade anelar com uma rede estacionária, e serão submetidos à força gravitacional que será medida como uma resposta temporal dos átomos no modo contra-propagante ao fóton que estimula a dinâmica coletiva de recuo. (3) Neste trabalho serão apresentadas algumas das caracterizações preliminares para a produção da luz necessária para segunda etapa de resfriamento assim como sua estabilidade. Informações referentes a cavidade anelar onde as oscilações de bloch terão lugar também são apresentadas.

Referências:

1 SAMOYLOVA, M. *et al* . Synchronization of Bloch oscillations by a ring cavity. **Optics Express** , v. 23, n. 11, p. 14823-14835, 2015. 2 STELLMER, S. **Degenerate quantum gases of strontium** . 2012. 246 p. Dissertation (Doctor of Science) - Faculty of Mathematics, Computer Science and Physics, University of Innsbruck, Innsbruck, 2012. 3 SAMOYLOVA, M. *et al* . Mode-locked Bloch oscillations in a ring cavity. **Laser Physics Letters** , v. 11, n. 12, p. 126005-1-126005-6, 2014.

PG169

Análise dos efeitos sono-fotodinâmicos com PpIX: estudos *in vitro* e *in vivo*.

VOLLET FILHO, J. D. ; PRATAVIEIRA, S. ; AYALA, E. T. P. ; BAGNATO, V. S. ; GARCIA, M. R. ; SOUSA, F. A. D. D.

volletfilho@gmail.com

A terapia sono-fotodinâmica (TSFD) é uma abordagem promissora para o tratamento do câncer, baseada na combinação da terapia fotodinâmica (TFD) e a terapia sonodinâmica (TSD). A TFD é um método terapêutico bem estabelecido para certos tipos de câncer de pele, enquanto que a TSD conseguiu gerar efeitos citotóxicos em regiões mais profundas do corpo. (1-2) Este estudo tem como objetivo analisar os mecanismos e efeitos da ação sono-fotodinâmica (SFD) utilizando a Protoporfirina IX (PpIX) como sono-fotossensibilizador. *In vitro*, uma série de soluções de PpIX 5 μM foram irradiadas com luz vermelha (635 nm, 30-50 mW/cm^2) (ação fotodinâmica (FD)), ultrassom (1 MHz, 1-2 W/cm^2) (ação sonodinâmica (SD)) e a combinação de ambas as fontes (ação SFD, FD+SD e SD+FD). Analisando os espectros de absorção da PpIX registrados durante cada processo, foi obtido que a taxa de decaimento da PpIX (k) induzida pela ação SFD foi a maior do que as induzidas pelas outras 4 ações, além de ser aproximadamente a soma daquelas induzidas pela ação FD e SD ($k_{\text{SPD}} \approx k_{\text{SD}} + k_{\text{FD}}$). *In vivo*, ratos foram injetados via intraperitoneal com uma dose de 500 mg/kg de 5-aminolevulínico (ALA) para carregar o fígado de rato com uma concentração alta de PpIX. (3) Após 3 horas da injeção (tempo para uma concentração ótima da PpIX no fígado), os fígados foram irradiados com luz (635 nm, $180 \pm 9 \text{ J}/\text{cm}^2$), ultrassom (1,0 MHz, $76 \pm 538 \text{ J}/\text{cm}^2$) e a combinação de ambas as fontes. Para esses procedimentos, foi construída uma única sonda capaz de irradiar luz e ultrassom individualmente e simultaneamente. O dano induzido no fígado por cada ação após 30 horas do tratamento, foi analisado através de um processamento histológico do tecido hepático, mostrando que a ação SFD e FD+SD induziram maior profundidade de necrose do que a ação FD ou SD. Esses resultados sugerem que a ação combinada pode melhorar a taxa de degradação da droga utilizada como sensibilizador, além de ter um escopo maior do que a ação PD ou SD, mas certamente deve ser mais amplamente estudada.

Referências:

- 1 RENGENG, L. *et al* . Sonodynamic therapy, a treatment developing from photodynamic therapy. **Photodiagnosis and Photodynamic Therapy** , v. 19, p. 159-166, Sept. 2017.
- 2 MCEWAN, C. *et al* . Comparing the efficacy of photodynamic and sonodynamic therapy in non-melanoma and melanoma skin cancer. **Bioorganic and Medicinal Chemistry** , v. 24, n. 13, p. 3023-3028, July 2016.
- 3 OTAKE, M. *et al* . Selective accumulation of ALA-induced PpIX and photodynamic effect in chemically induced hepatocellular carcinoma. **British Journal of Cancer** , v. 89, n. 4, p. 730-736, Aug. 2003.

PG170

Efeitos da acidificação dos oceanos sobre a toxicidade das nanopartículas de óxido de Cério e Zinco (CeO₂ - ZnO) na microalga marinha *Navicula* sp.

TUESTA, M. A. M. ; ZUCOLOTTO, V.

monterotuesta@usp.br

Desde os tempos pré-industriais, o oceano absorve continuamente mais de 40% do CO₂ antropogênico, reduzindo o pH da água do mar e causando a acidificação dos oceanos (AO). O Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), prevê uma queda de 0,3 para 0,5 unidades no pH dos oceanos até o final do século, caso não haja uma redução significativa nas emissões de CO₂. (1) Os efeitos da AO não atuam isoladamente, sendo intensificada pela ação simultânea de outros fatores como o afluxo de metais pesados, a eutrofização e o enriquecimento orgânico. Há 10 anos, a produção de nanomateriais tem aumentado, consideravelmente, devido as suas características físico-químicas e versatilidade de uso. A Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico (OCDE), considera esses materiais como poluentes emergentes dos corpos d'água. Devido às suas propriedades intrínsecas, grande demanda e importância comercial, as nanopartículas (NPs) de óxidos metálicos, como o óxido de Cério e Zinco (Ce₂O, ZnO), têm despertado grande interesse e preocupação. (2) Essas NPs têm sido objeto de estudo em diversas áreas da ciência, no entanto, dados sobre seus possíveis efeitos tóxicos combinados com a AO sobre as microalgas marinhas, ainda são escassos. Quando NPs estão presentes em sistemas aquáticos continentais, estuarinos ou marinhos, as combinações com outros poluentes e as variações no pH, podem influenciar seu comportamento e, por consequência, sua toxicidade. O objetivo deste estudo é verificar o efeito da AO sobre a toxicidade das NPs de Ce₂O e ZnO na microalga marinha *Navicula* sp. Um dos principais produtores primários da cadeia alimentar dos ecossistemas marinhos. Para avaliar a toxicidade da combinação entre a AO e a concentração de NPs na microalga *Navicula* sp., será usada a metodologia proposta por Xia *et al.* (2018) (3) para a obtenção de dados sobre: I) a inibição do crescimento de *Navicula* sp. em condições oceânicas normais e em AO; II) a atividade enzimática antioxidante refletida na produção de espécies reativas de oxigênio (ROS), tais como catalase (CAT), superóxido dismutase (SDP), glutathione peroxidase (GPx) e peroxidação lipídica (LPO) e III) a estabilidade de NPs no meio marinho e sua internalização na microalga *Navicula* sp. Como resultado preliminar, o raio hidrodinâmico de ambas NPs foi determinado, encontrando-se um valor de 160 nm para NP CeO₂ e 180 nm para NP de ZnO, o Nanoparticle Tracking Analysis (NTA) foi utilizada para as medições. Os resultados possibilitarão uma melhor compreensão do risco ambiental marinho causado por NPs, sob futuras condições de acidificação oceânica.

Referências:

1 STOCKER, T. F. *et al.* (ed.) **Climate change 2013** : the physical science basis. Cambridge: Cambridge University Press, 2013. 2 ORGANIZACIÓN DE LAS NACIONES UNIDAS PARA LA EDUCACIÓN, LA CIENCIA Y LA CULTURA. Instituto de Estadística de la UNESCO. **Nanotecnología** : una visión general basada en indicadores y estadísticas. 2009. (DSTI/DOC(2009)7–JT03267289). DOI 10.1787/18151965. 3 XIA, B. *et al.* Ocean acidification increase the toxic effects of TiO₂ nanoparticles on the marine microalga *Chlorella vulgaris* . **Journal of Hazardous Materials** , v. 15, n. 346, p. 1-9, 2018.

PG171

Corrente persistente e torque por transferência de spin em heteroestruturas do tipo IT/FM

ARAUJO, R. D. N. ; EGUES, C. ; ZANON, J.

ronaldonasaraujo@gmail.com

Materiais topológicos tem sido alvo de muito estudo em anos recentes, visto a aplicação em computação quântica (topológica). Em 2D a hamiltoniana básica para um isolante topológico (IT) é dada pelo modelo BHZ (1) nele a topologia do material pode ser acessada mudando um parâmetro M que para valores positivos resulta em um isolante de banda e negativos há o aparecimento de estados de borda. A forma desses estados depende da forma da banda de bulk que quando é parabólica temos estados que decaem exponencialmente perto da borda, já para bandas do tipo chapéu mexicano surgem estados evascente. Experimentos recentes tem proposto junções tipo isolante topológico/metal ferromagnético (IT/FM) (2) e IT/Supercondutor, onde os estados de borda do IT vazam para o outro lado da junção. Neste trabalho, focamos em junções do tipo IT/FM e consideramos diferentes regimes para a camada topológica: banda parabólica e tipo chapéu mexicano, topológicos e não-topológicos. (3) Mostramos que o vazamento do estado de borda no regime topológico faz surgir uma corrente persistente de spin e carga corre paralela a interface dos materiais com a corrente fluindo em direções opostas nos dois materiais. Quando um campo elétrico é aplicado a corrente e induz polarização de spin próximo a impurezas e isso depende essencialmente da magnetização no ferromagneto. O torque no spin devido a corrente é em sua maioria do tipo *fieldlike* (susceptibilidade na direção z) e aparece quando existe uma componente de magnetização em z .

Referências:

1 BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. **Science**, v. 314, n. 5806, p. 1757-1761, 2006. 2 SHAO, Q. *et al*. Strong Rashba-Edelstein effect-induced spin-orbit torques in monolayer transition metal dichalcogenide/ferromagnet bilayers. **Nano Letters**, v. 16, n. 12, p. 7514-7520, 2016. 3 ZEGARRA, A.; EGUES, J. C.; CHEN, W. Persistent currents and spin torque caused by percolated quantum spin hall state. **Physical Review B**, v. 101, n. 22, p. 224438-1-224438-10, 2020.

PG172

Framework para a determinação semiautomática de Hamiltonianos efetivos a partir de estruturas de bandas preexistentes

WANDERLEY, A. B. ; SIPAHI, G. M. ; SILVA, J. L. F. D.

adilson.wanderley@usp.br

Compreender a estrutura eletrônica dos semicondutores é fundamental para o desenvolvimento de novas tecnologias como: computadores mais rápidos, LEDs, células solares e materiais eletrônicos. Em modelos teóricos as propriedades eletrônicas em nanoescala são obtidas por Hamiltonianos efetivos, que podem descrever estruturas de bandas de maneira realística com baixo custo computacional. Estes Hamiltonianos descrevem os *spin splitting* e permitem a descrição de fatores-g efetivos em semicondutores III-V, onde a precisão dos cálculos depende da inclusão de bandas distantes.(1) Um método bem-sucedido e muito utilizado na construção desses Hamiltonianos é o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$.(1-2) Os elementos do Hamiltoniano matricial são obtidos com uso da teoria de perturbação de Löwdin e termos de massa efetiva, que vão além da ordem zero. Tais termos dependem de parâmetros que podem ser determinados pela simetria do grupo cristalino do material. A partir desta abordagem, o grupo do Laboratório de Física Computacional do IFSC em parceria com o QTNano do IQSC, desenvolveu um método que permite extrair parâmetros preexistentes das estruturas de bandas envolvendo um *fitting* com estruturas de bandas de Hamiltonianos previamente calculados.(1,3) Contudo, nos casos em que os *spin splitting* são da ordem do *gap*, existem poucos parâmetros para construção desses Hamiltonianos disponíveis na literatura. Neste contexto, propõem-se o uso de ferramentas computacionais, que permitam automatizar processos realizados manualmente, podendo reduzir os erros e gerar um ganho de tempo na inserção desses parâmetros. Propõem-se ainda o uso de *High Throughput in Material Science* com técnicas de inteligência artificial, como *Machine Learning*, na predição dos parâmetros permitindo a construção de Hamiltonianos de ordem zero mais realísticos e com um ganho no tempo de execução.(2) Com isso, será possível gerar um classificador de Hamiltonianos alternativos, que utiliza teoria de grupos e propriedades de simetria, e a construção de uma base de dados que auxiliará na busca por novos materiais.

Referências:

1 BASTOS, C. M. O. *et al* . A comprehensive study of g-factors, elastic, structural and electronic properties of III-V semiconductors using hybrid-density functional theory. **Journal of Applied Physics**, v. 123, n. 6, p. 065702, 2018. 2 MARQUARDT, O. *et al* Multiband $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ model and fitting scheme for ab initio based electronic structure parameters for wurtzite GaAs. **Physical Review B** , v. 101, n. 23, p. 235147, 2020. 3 BASTOS, C. M. O. *et al* . Stability and accuracy control of $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ parameters. **Semiconductor Science and Technology** , v. 31, n. 10, p. 105002, 2016.

PG173

Análise evolutiva e estrutural de genes associados ao diabetes tipo 02

MOTA, D. ; MARCO, R. D.

diogomaciel@usp.br

O Diabetes Mellitus Tipo 02 (DM2) é uma doença metabólica caracterizada por hiperglicemia derivada dos defeitos na ação da insulina, e representa entre 90-95% dos casos da doença. Sua manifestação é dependente de alelos mutantes em múltiplos loci gênicos.(1) Devido à alta prevalência do DM2, argumenta-se que a maioria dessas mutações devem ter possuído um caráter neutro ou positivo durante a evolução da espécie humana.(2) Presentemente, é pouco conhecido o efeito dessas mutações no processo de *splicing* e de regulação do processo de transcrição dos genes associados, e seu impacto na fisiologia humana. Diante disso, sugerimos uma análise baseada em um estudo evolutivo e estrutural dos genes associados ao DM2 com o objetivo de verificar se genes contendo mutações possuem uma menor conservação do seu perfil de expressão gênica ao longo da evolução dos vertebrados do que a média de genes de perfil de expressão semelhante que não estejam associados ao DM2; verificar se as posições onde encontram-se as mutações associadas ao DM2 não apresentam mutações recorrentes ao longo da evolução de vertebrados. A análise destes dados permitirá verificar se a alta prevalência de mutações associadas ao DM2 poderia derivar do fato delas afetarem estruturas ou padrões de expressão que seriam naturalmente mais flexíveis e que, portanto, teriam baixo potencial deletério. Em adição, testaremos se a alta prevalência também poderia ser derivada de uma tendência destes sítios sofrerem mutações recorrentes. Descrevemos diversas análises computacionais buscando correlacionar *single nucleotide polymorphism* (SNPs) associados ao DM2 detectados em análises de *Genome-Wide Association Studies* (GWAS) com características dos genes afetados ou adjacentes aos polimorfismos. Com o objetivo de aumentarmos nosso poder estatístico, utilizamos os dados de SNPs associadas a diferentes alterações fenotípicas, inclusive DM2, que estão disponíveis no banco de dados *Gwas Catalog* (<https://www.ebi.ac.uk/gwas/>), esse banco conta com dados de 4410 publicações e 172351 associações. Essa escolha permitiu agregar uma população controle com milhares de pontos, fortalecendo as análises estatísticas. Com base nesses dados, foi possível verificar que SNPs associadas ao DM2 tendem a se localizar preferencialmente em regiões intergênicas, quando comparados com todas as outras SNPs relacionadas aos outros fenótipos. Além disso, as SNPs relacionadas ao DM2 tendem a apresentar maior distância do início da transcrição. Quando considerada apenas a população de genes tecidos específicos, SNPs associadas ao DM2 tendem a ocorrer em genes que apresentam menor variação entre os indivíduos, quando comparadas com a população de SNPs associadas a outras alterações fenotípicas.

Referências:

- 1 MAHAJAN, A. *et al* . Fine-mapping type 2 diabetes loci to single-variant resolution using high-density imputation and islet-specific epigenome maps. **Nature Genetics** , v. 50, n. 11, p.1505-1513, 2018. DOI: 10.1038/s41588-018-0241-6.
- 2 SÉGUREL, L. *et al* . Positive selection of protective variants for type 2 diabetes from the Neolithic onward: a case study in Central Asia. **European Journal of Human Genetics** , v. 21, n. 10, p.1146-1151, 2013.

PG174

Influência de algumas características topológicas na estabilidade e complexidade de redes neurais aleatórias.

TEODOSIO, N. ; TRAVIESO, G.

nathan.teodosio@usp.br

Em redes neurais artificiais, cada neurônio é um nó e cada sinapse uma ligação dirigida da rede. Este estudo tem por objetivo avaliar a estabilidade de redes neurais artificiais com parâmetros que as aproximem de redes neurais reais. Até agora, os parâmetros em questão são: 1 esparsidade: Dentre todas as ligações possíveis, apenas uma pequena quantidade realmente existe. 2 adequação à Lei de Dale: Um neurônio estimula outros com o mesmo estímulo independentemente do tipo de cada neurônio alvo. Os resultados preliminares mostram que a estabilidade da rede é preservada ao se imporem essas duas características. (1)

Referências:

1 RAJAN, k.; ABBOTT, L. F. Eigenvalue spectra of Random matrices for neural networks. **Physical Review Letters** , v. 97, n. 18, p. 188104, 2006.

PG175

Estudo estrutural e funcional de hidrolases de glicosídeos celulosômicos termofílicas envolvidas no processo de hidrólise de biomassa lignocelulósica

ALMEIDA, L. R. D. ; GARCIA, W. ; MUNIZ, J. R. C.

al_leo@usp.br

O esgotamento das reservas de petróleo, a crescente demanda energética de países emergentes e a necessidade de redução da emissão de dióxido de carbono sinalizam a importância pela busca de novas fontes de energias renováveis. Contudo, para que tais fontes tenham um caráter de efetiva substituição e não apenas de complementação, se fazem obrigatórias pesquisas por novas formas de se obtê-la. Assim, a produção do bioetanol mediante a hidrólise de biomassas lignocelulósicas, como do bagaço de cana-de-açúcar, tem recebido grande destaque. (1) Devido ao seu potencial de evolução e redução de custos, a hidrólise enzimática da celulose pode ser uma peça fundamental para a produção de bioetanol de segunda geração a um custo competitivo em longo prazo. (2) Algumas bactérias termofílicas, como *Clostridium thermocellum*, produzem um complexo proteico multienzimático extracelular chamado celulosomo, que demonstra elevada capacidade de realizar uma eficiente degradação de biomassa celulósica, em especial na porção cristalina da celulose. (3) O objetivo principal desse projeto de pesquisa é caracterizar as enzimas β -glicosidases (BGIs) celulosômicas de *C. thermocellum* de diferentes famílias de hidrolases de glicosídeos (GHs), por meio de técnicas estruturais, bioquímicas e biofísicas. Parte disso já foi realizado até o momento para CtBG1 e CtBG3 (*C. thermocellum* BGL GH1 e GH3). E que isso permita comparar com outras BGIs reportadas na literatura. Os genes CtBgl1A e CtBgl3B clonados, tiveram as proteínas expressas em *Escherichia coli* (BL21) e até o momento apenas CtBG3 foi purificada com sucesso após cromatografia de afinidade e de separação por massa molecular. A enzima purificada tem característica termofílica, mostrando alta atividade em temperatura acima de 60 °C em pH de 4,5-7,0. Apresentando maior atividade em pH 5,5 a 70 °C. Curiosamente apresentando temperatura de *melting* (t_m) em 70 °C, determinados por meio de fluorimetria diferencial de varredura (DSF) e dicróismo circular (CD). Além disso, teve avaliada sua atividade enzimática com os parâmetros: constante de Michaelis-Menten $K_m = 0,45(mM)$, constante catalítica $k_{cat} = 201(s^{-1})$, e eficiência catalítica $k_{cat}/K_m = 444(mM^{-1}s^{-1})$. A enzima também demonstrou capacidade em atuar contra os substratos sintéticos como PNPX (40%) e CPNPG2-100 (25%). Enquanto no teste de aditivos, teve sua capacidade de conversão aumentada chegando até 300% na presença de Triton, 200% com Tween 20 e 110% com EDTA. Por outro lado apresentou queda significativa nas reações com a presença de íons divalentes, DMSO e SDS respectivamente abaixo de 60%. A estrutura cristalográfica de CtBG3 foi determinada por meio da difração de raios-X usando substituição molecular, com 2.34 [U+212B] de resolução, demonstrando um arranjo dimérico, indicadores da qualidade do refinamento R_{work} e R_{free} , respectivamente 0,21 e 0,24. Experimentos de espalhamentos de luz em múltiplos ângulos (MALS) e espalhamento de raios-X a baixo ângulos (SAXS) corroboram que em solução CtBG3 também adota arranjo dimérico.

Referências:

1 LIU, J. *et al* . Systems integration for global sustainability. **Science** , v. 347, n. 6225, p. 963, 2015. 2 BORNSCHEUER, U. *et al* . Enzymatic degradation of (ligno)cellulose. **Angewandte Chemie International Edition** , v. 53, n. 41, p. 10876–10893, 2014. 3 KAHN, A. *et al* . Evaluation

of thermal stability of cellulosomal hydrolases and their complex formation. *In* : LÜBECK, M. (ed.). **Cellulases** : methods and protocols. New York: Springer, 2018. p. 153–166.

PG176

Passeios quânticos

NAVES, C. B. ; SOARES-PINTO, D. O.

caio.naves@usp.br

Passeios quânticos são a extensão dos passeios aleatórios clássicos para um sistema quântico. (1) Um passeio aleatório clássico trata-se de uma cadeia de Markov de tempo discreto, ou seja, uma sequência de variáveis aleatórias que descrevem a posição do caminhante em uma rede, cuja dependência probabilística entre as variáveis ocorre apenas entre as indexadas por instantes de tempo subsequentes. Já os passeios quânticos, tratam-se da evolução determinística de um sistema que pertence ao espaço de Hilbert $\mathbb{H} = \mathbb{H}_p \otimes \mathbb{H}_c$, onde \mathbb{H}_p é o espaço de posição na rede e \mathbb{H}_c o espaço da moeda, usualmente um sistema composto por subsistemas de dois níveis cujo estados são associados a deslocamentos em uma dada direção. A evolução de um passeio quântico é decomposta em dois passos, descritos pelo operador moeda \hat{C} e pelo operador de deslocamento \hat{S} , respectivamente, de modo que o operador de evolução unitário é dado por $\hat{U} = \hat{S}[\mathbb{I} \otimes \hat{C}]$. O operador moeda faz o papel da jogada da moeda no caso clássico – que determina, com uma dada probabilidade, em qual direção o caminhante irá se deslocar – colocando o estado da moeda em uma superposição dos elementos da sua base. Já o operador de deslocamento atualiza o estado de posição do caminhante de acordo com os estados da moeda. Uma das características dos passeios quânticos que contrasta com os passeios aleatórios clássicos é o fato de que, assintoticamente, a variância da posição cresce quadraticamente com o tempo, enquanto que no caso clássico ela cresce linearmente, assim apresentando um caráter superdifusivo. As perspectivas do presente estudo são de realizar uma transição do passeio aleatório clássico de elefante (2), um passeio aleatório cujo deslocamento em um dado instante de tempo depende dos deslocamentos dados em todos os instantes de tempo anteriores e portanto um processo não-markoviano, para o caso quântico (3) e analisar os possíveis efeitos da memória na variância e na distribuição de probabilidades.

Referências:

1 AHARANOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum Random walks. **Physical Review A**, v. 48, n. 2, p. 1687-1690, 1993. 2 SCHÜTZ, G. M.; TRIMPER, S. Elephants can always remember: exact long-range memory effects in a non-Markovian Random walk. **Physical Review E**, v. 70, n. 4, p. 045101, 2004. 3 MOLFETTA, G. D.; SOARES-PINTO, D. O.; QUEIRÓS, S. M. D. Elephant quantum walk. **Physical Review A**, v. 97, n. 6, p. 062112, 2018.

PG177

Cordas cósmicas com módulos excitados não-abelianos

GREGORIO, G. M. ; HARTMANN, B.

gustavo.gregorio@usp.br

O objetivo do projeto é discutir cordas abelianas com módulos não abelianos e mostrar que esses módulos podem ser excitados. Em (1) foi mostrado que ambos os modos podem coexistir, portanto sendo possível fazer esse estudo. Queremos mostrar que a presença de um módulo não abeliano excitado pode levar a uma redução da tensão, tendo energias inferiores as de ANO (abelianos), também mostrado em (1) para alguns exemplos. Nesse novo estudo será utilizado a presença de um novo campo escalar, similar ao feito em (3) para poder obter a redução da energia por unidade de comprimento da corda. Para isso foram utilizados métodos numéricos descritos em (2) com alterações dos parâmetros da corda.

Referências:

1 MONIM, S.; SHIFMAN, M. **Degeneracy between Abelian and non-Abelian Strings** . 2013. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/1309.4527.pdf>. Acesso em: 30 set. 2020. 2 ASCHER, U.; CHRISTIANSEN, J.; RUSSELL, R. D. Collocation software for boundary-value ODEs. **ACM Transactions on Mathematical Software** , v. 7, n. 2, p. 209–222, 1981. DOI: 10.1145/355945.355950. 3 HARTMANN, B.; MICHEL, F.; PETER, P. Excited cosmic strings with superconducting currents, **Physical Review D** , v. 96, n. 12, p. 123531, 2017.

PG178

Dipolar Bose-Einstein condensate confined in spherically symmetric traps

DINIZ, P.

pedro.diniz@usp.br

We consider the fundamental state of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap, that is, a potential for spherically symmetrical confinement in the shape of a shell. By means of a Gaussian ansatz for the radial part of the wave function and a generic variational expression for the angular part, we were able to obtain an analytical description for the total energy of the system, which was minimized numerically. Thus, the properties of the ground state were successfully determined in the case in which the polarized atoms interact by long-range anisotropic dipole interactions and also by short-range isotropic contact interactions at the thin shell limit. Notably, it was observed that the variation of the relative intensity between these two interactions implies a continuous deformation in the geometry of the condensate: for regimes in which the contact interaction dominates, the system assumes the shape of a spherical shell. For regimes in which the dipole-dipole interaction dominates, the atoms tend to cluster around the "equator" of the spherical surface, that is, the geodesic contained in the plane whose normal vector coincides with the direction of polarization of the atoms. We found that the angular width of this ring saturates for strongly dipolar regimes. This peculiar behavior was later confirmed to be due to an interplay between the repulsive and attractive characters of the dipole-dipole interaction. For this, a planar modeling of the problem was made, and the results for the saturation width coincide very well with the observed in the spherical case. Furthermore, after an exhaustive variation of all relevant parameters, we corroborated the natural hypothesis that the greater the radius of the spherical confining region and, therefore, the lower the curvature of the condensate, the better the planar modeling. (1) Our goal now is to extend this analysis to a much more general case: first, we consider a trapping potential that contains a parameter which controls a continuous deformation between a usual harmonic trap to the bubble trap, with a topological transition taking place when the density value vanishes at the center of the cloud. Furthermore, since dipolar condensates tend to elongate in the direction of polarization, we will allow spheroidal deformations for the angular solution. For the radial part, we will work with the Thomas-Fermi solution, that is, the approximation that results from the hypothesis that the kinetic energy of the system is negligible in comparison with the interactions. We hope to see interesting combinations between disparate behaviors: accumulation of atoms around the equator and elongation of the condensate in the direction of polarization. In addition, we have control over two different topological transitions: one resulting from the trap deformation and the other resulting from the dipolar interaction force. For the near future, we intend to solve this same problem using completely numerical methods in order to compare with the analytical results.

Referências:

1 DINIZ, P. C.; OLIVEIRA, E. A. B.; LIMA, A. R. P.; HENN, E. A. L. Ground state and collective excitations of a dipolar Bose-Einstein condensate in a bubble trap. **Scientific Reports**, v. 10, p. 4831, 2020. • DOI: 10.1038/s41598-020-61657-0..

PG179

Automação de um FrontEnd de RMN para controle de periféricos em baixa velocidade

MONTES, R. ; TANNUS, A.

rafael.silva.montes@usp.br

O desenvolvimento de técnicas de ressonância magnética tem se mostrado fundamentais pois elas têm grande aplicabilidade na indústria, em análises clínicas, no estudo morfológico da estrutura do material, entre outros. Assim, o desenvolvimento de um espectrômetro com ampla aplicabilidade, como o desenvolvido pelo grupo CIERMag, tem ampla relevância. Os sinais gerados pelo espectrômetro passam por um FrontEnd que faz uso de uma técnica que envolve a utilização de múltiplos canais, necessitando de circuitos para intermediar as transmissões e recepções dos sinais captados e gerados. No momento da atuação de uma aplicação deve-se ter o controle de diversas variáveis que podem interferir nos resultados obtidos ou mesmo danificar os equipamentos, como, por exemplo, alterações da temperatura da bobina de gradiente, o controle de uma cama ou outro periférico que seja essencial para uma determinada aplicação entre outros. Dessa maneira, este projeto propõe um dispositivo de controle dos sensores, dispositivos periféricos e do FrontEnd, no caso desse último, para obter um maior domínio sobre as atribuições dos sinais dos canais de recepção e de transmissão e atribuir atenuações para os transmissores e receptores da maneira que um usuário desejar. (1)

Referências:

1 SOUZA, P. V. B. D. **Desenvolvimento de um subsistema non-real-time para o gerenciamento de dispositivos periféricos e desenvolvimento de interfaces gráficas** . 2016. 120 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

PG180

Da catálise à inibição: mecanismos enzimáticos e caracterização de potenciais inibidores da diadenilato ciclase de *S. aureus*: um novo alvo molecular essencial

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

raphael.meneghello@usp.br

Segundos mensageiros são moléculas utilizadas por todos os organismos capazes de desencadear diversas cascatas moleculares em resposta aos estímulos do ambiente. Especialmente em bactérias, os segundos mensageiros mais comuns são baseados em nucleotídeos, cAMP, (p)ppGpp e c-di-GMP. Mais recentemente, um novo segundo mensageiro foi descoberto, o c-di-AMP. (1) Encontrado principalmente em bactérias Gram-positivas, controla uma variedade de processos fisiológicos, como homeostase da parede celular, manutenção da integridade do DNA, transporte iônico e expressão gênica. Ainda, dentre os segundos mensageiros baseados em nucleotídeos, é o único essencial. O c-di-AMP é sintetizado a partir da condensação de duas moléculas de ATP, por enzimas que contêm o domínio Diadenilato Ciclase (DAC). Embora algumas bactérias expressem diferentes proteínas DAC, como *Bacillus subtilis* que possui três subtipos de diadenilato ciclases em seu genoma (CdaA, CdaS e DisA), a grande maioria possui apenas o gene para a CdaA, subfamília mais abundante, como é o caso dos patógenos humanos *Staphylococcus aureus* e *Listeria monocytogenes*. Dessa forma, isso as torna um novo alvo molecular para o desenvolvimento de novos fármacos. As CdaA são proteínas transmembranares, cuja função é manter a síntese basal de c-di-AMP. Recentemente, estudos estruturais da CdaA de *S. aureus* (SaCdaA) (2) e *L. monocytogenes* (LmCdaA) (3) revelaram um dímero catalítico, cujos sítios ativos de cada protômero estão em lados opostos e, portanto, não são capazes de realizar a conversão do ATP em c-di-AMP. Nesse trabalho, estudos cristalográficos e biofísicos com a SaCdaA mostraram que a ligação do substrato induz mudanças conformacionais na interface dimérica essencial, promovendo o correto arranjo dos resíduos catalíticos para a catálise a partir do encontro de dois dímeros vizinhos. Ainda, é apresentada a busca e desenvolvimento de moléculas com potenciais inibitórios, a partir de dados cristalográficos e de cinética inibitória. Dada a importância da CdaA, principalmente em bactérias como a *S. aureus*, capazes de se adaptarem e adquirir facilmente mecanismos de resistência, nossos resultados contribuem para o entendimento do mecanismo catalítico e mostra um inédito sítio alostérico de inibição da CdaA, aumentando seu interesse como alvo molecular no desenvolvimentos de novos antibióticos.

Referências:

- 1 CORRIGAN, R. M.; GRÜNDLING, A. Cyclic di-AMP: another second messenger enters the fray. **Nature Reviews Microbiology** , v. 11, n. 8, p. 513-524, 2013. DOI: 10.1038/nrmicro3069.
- 2 TOSI, T.; HOSHIGA, F.; MILLERSHIP, C.; SINGH, R.; ELDRID, C.; PATIN, D.; MENGIN-LECREULX, D.; THALASSINOS, K.; FREEMONT, P.; GRÜNDLING, A. Inhibition of the *Staphylococcus aureus* c-di-AMP cyclase DacA by direct interaction with the phosphoglucosamine mutase GlmM. **PLOS Pathogens** , v. 15, n. 1, p. e1007537, 2019. DOI: 10.1371/journal.ppat.1007537.
- 3 HEIDEMANN, J. L.; NEUMANN, P.; DICKMANN, A.; FICNER, R. Crystal structures of the c-di-AMP-synthesizing enzyme CdaA. **Journal of Biological Chemistry** , v. 294, n. 27, p. 10463-10470, 2019. DOI: 10.1074/jbc.RA119.009246.

PG181

Caracterização de jamming avoidance response em gymnotiformes e modelo de deflexão de seu campo elétrico em coespecíficos

CESARINO, V. ; PINTO, R. D.

vinicius.cesarino@usp.br

A descarga do órgão elétrico (DOA) do *Gymnotus carapo* (peixe pulsador) assume duas importantes funções no repertório comportamental do espécime: eletrolocalização e eletrocomunicação coespecífica, onde esta última é representada por uma variedade de alterações no intervalo entre os pulsos elétricos do peixe (IPI). Apesar do comportamento elétrico chamado de Jamming Avoidance Response (JAR) ser característico e bem documentado em espécies de peixes onduladores, um comportamento correspondente no gymnotiforme foi encontrado em resultados preliminares, sendo observados em peixes com IPIs próximos.(1) Nossas observações sugerem uma correlação entre a quantidade de JAR observada com a distância entre dois peixes fixados paralelamente. Tal estudo foi dirigido posicionando dois peixes em diferentes orientações e distâncias. Utilizando desta relação entre JAR e a distância entre dois peixes fixados foi possível inferir a distância necessária para que um peixe mude seu comportamento elétrico na presença de um coespecífico, bem como mapear o seu campo elétrico e criar um modelo de deflexão deste no corpo do outro peixe. Para tanto, três amplificadores de Instrumentação de entrada do tipo FET de alta velocidade (INA111) foram feitos sob medida para criar uma sonda tridimensional de tamanho reduzido capaz de captar e amplificar o sinal elétrico do peixe desprezando ruído de modo comum.

Referências:

1 GUARIENTO, R. T. *et al* . Automated pulse discrimination of two freely-swimming weakly electric fish and analysis of their electrical behavior during dominance contest. **Journal of Physiology** ,v.110,p. 216–223,2016. DOI 10.1016/j.jphysparis.2017.02.001.

PG182

Fase geométrica, efeito Aharonov-Bohm, e as bases da mecânica quântica

ISRAEL, I. ; MAIA, L. P.

iago.israel@usp.br

Desde a publicação do trabalho seminal de Sir Michael Berry em 1984 (1), as fases geométricas tornaram-se grandezas bem populares em física teórica. Enquanto a maioria dos não especialistas depara-se com esse tema apenas ao estudar em livros-texto a evolução cíclica e adiabática de um Hamiltoniano dependente do tempo, na verdade a fase de Berry é relevante para a compreensão de temas tão diversos quanto os efeitos Hall quânticos, teorias topológicas de bandas e para a proposta de computação quântica holonômica. Esses desenvolvimentos posteriores a (1), tanto em aplicações quanto em princípios teóricos, deixaram claro que fases geométricas poderiam ocorrer em evoluções adiabáticas não cíclicas, em evoluções não adiabáticas ou mesmo apresentar caráter não Abelian, por exemplo. Além disso, percebeu-se a posteriori que diversas manifestações de fases geométricas já haviam sido descobertas anteriormente a (1), como no efeito Aharonov-Bohm e em óptica de polarização, e que elas também em problemas puramente geométricos ou de física clássica. Entretanto, a complexidade das ferramentas matemáticas necessárias para uma compreensão profunda das fases geométricas faz com que muitos pesquisadores focados nas aplicações incorporem essas grandezas em seus cálculos via procedimentos ad hoc, sem realmente entenderem as diferenças entre os diferentes casos. De fato, pouco após a introdução do conceito por M. Berry, Barry Simon percebeu (2) que, genericamente, uma fase geométrica pode ser interpretada como uma holonomia de um fibrado em uma variedade e que o potencial de calibre pertinente pode ser visto como uma conexão nesse fibrado. O objetivo deste trabalho é o estudo das técnicas de geometria diferencial (transporte paralelo, conexões, fibrados) que permitam a caracterização das diferentes holonomias de sistemas físicos de forma sistemática. A abordagem consiste na busca por uma sólida compreensão dos conceitos matemáticos relevantes, mas guiada por associações diretas com fenômenos físicos.(3)

Referências:

1 BERRY, M. V. . Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. **Proceedings of the Royal Society of London A** : mathematical, physical and engineering sciences, v.392, n.1802,p.45,1984. 2 SIMON, B. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and Berry's phase. **Physical Review Letters** ,v. 51,n.24, p.2167 1983. 3 GARRITY, T. A. **Electricity and magnetism for mathematicians** : a guided Path from Maxwell's equations to Yang-Mills. New York: Cambridge University Press, 2015.

PG183

Avaliação da radiação ultravioleta C para descontaminação de órgãos para transplante em modelos *in vitro* e *in vivo*

GÁMEZ, Y. M. ; VOLLET FILHO, J. D. ; INADA, N. M. ; BAGNATO, V. S. ; KURACHI, C.

ymatosg@usp.br

Segundo Associação Brasileira de Transplantes atualmente no Brasil há um total de 40740 pacientes ativos em lista de espera de transplante de órgãos.(1) A disponibilidade de órgãos é um fator limitante para o transplante, trazendo como consequência altas taxas de mortalidade dos pacientes cadastrados na lista de espera. A infecção dos órgãos por microrganismos patogênicos cada vez mais resistentes aos antibióticos é uma das causas do descarte de órgãos para transplante devido ao alto risco de transmissão ao receptor e consequentes problemas associados ao paciente. A radiação ultravioleta é uma modalidade terapêutica estabelecida para a inativação de microrganismos patogênicos (2) e, quando conjugada à perfusão *ex vivo* do órgão pode se tornar uma alternativa para o tratamento de enxertos contaminados.(3) O presente estudo tem como principal objetivo a avaliação da radiação ultravioleta C como alternativa para a descontaminação de órgãos infectados por microrganismos patogênicos. Foram realizados testes de inativação bacteriana *in vitro* usando modelos simulando a perfusão *ex vivo* de órgão e um teste piloto em fígado de rato Wistar. Uma câmara de filtragem foi construída para simular o órgão e as possíveis barreiras que se encontram no interior do órgão e que podem reter os microrganismos. Nesse modelo, foi obtida uma inativação de 10⁶ UFC que se encontravam no perfusato circulante com 1 hora de irradiação e uma energia de entregue de 19 J/cm³. No entanto, a remoção parcial de bactérias das membranas, bucha vegetal ou do fígado infectado, resultou em uma resposta parcial da descontaminação. Métodos alternativos e complementares para a melhor lavagem ou tratamento do órgão são necessários.

Referências:

- 1 ASSOCIACAO BRASILEIRA DE TRANSPLANTES DE ORGAOS. **Registro Brasileiro de Transplantes**. São Paulo: ABTO, 2020. Disponível em: <https://docs.google.com/viewerng/viewer?url=https://site.abto.org.br/wp-content/uploads/2020/08/rbt-1sem-final-leitura.pdfhl=en>. Acesso em: 30.09.2020.
- 2 WU, X. *et al*. Ultraviolet blood irradiation: is it time to remember "the cure that time forgot" **Journal of Photochemistry and Photobiology B : biology**, v. 157,p. 89-96, 2016. DOI: 10.1016/j.jphotobiol.2016.02.007.
- 3 GALASSO, M. *et al*. Inactivating hepatitis C virus in donor lungs using light therapies during normothermic *ex vivo* lung perfusion. **Nature Communications**, v.10 n.1, p.1-12,2019..

PG184

Mudanças na rede de águas podem explicar a diferença de afinidade de ligação da colchicina com as isoformas II e III da tubulina

SALCEDO, D. L. P. ; ANDRICOPULO, A. D.

palomino@ifsc.usp.br

Os microtúbulos, filamentos formados pela polimerização de β -tubulina, são um componente básico do citoesqueleto das células eucarióticas e desempenham um papel crucial na formação do fuso mitótico durante a divisão celular.(1) O que torna eles um alvo molecular atraente para o desenho de novos agentes anticâncer. A colchicina foi o primeiro composto identificado como um agente que liga microtúbulos (Microtubule Targeting Agent, MTA). Ela se liga no monômero β do dímero de β -tubulina. O domínio ligação da colchicina pode interagir com uma ampla variedade de entidades químicas, entre as que há compostos desestabilizadores da polimerização de microtúbulos muito potentes. No entanto, devido à falta de um perfil de risco-benefício aceitável, nenhum dos MTAs conhecidos que se ligam ao domínio da colchicina chegaram ainda ao mercado. Existem oito isoformas da α -tubulina e sete da β -tubulina. Essas isoformas possuem sequência altamente conservada, diferindo principalmente na região C-terminal, um peptídeo altamente desordenado com 18-24 resíduos.(2)A superexpressão da tubulina β III está relacionada com a resistência ao Taxol (MTA estabilizador da polimerização de microtúbulos) em alguns tipos de câncer. Porém, tem sido demonstrado que os compostos que se ligam ao domínio da colchicina não apresentam esse tipo de resistência. O primeiro composto identificado como MTA foi a colchicina, um alcalóide tricíclico extraído da planta *Colchicum autumnale*. A colchicina é usada no tratamento de gota, artrite gotosa, febre familiar do Mediterrâneo, doença de Bechet e pericardite recorrente com efusão.(3) Desde a década de 1990, sabe-se que a colchicina tem maior afinidade pela isoforma β II do que pela β III da tubulina, mas ainda não é totalmente claro o por que dessa diferença. Neste trabalho, usando as técnicas de modelagem por homologia e dinâmica molecular, são analisadas as mudanças na rede de águas na ligação da colchicina com seu domínio nas isoformas β II e β III da tubulina. Usando GROMACS, três trajetórias independentes de 200 ns cada foram geradas para os dois complexos proteína-ligante, modelados com MODELLER a partir da estrutura PDBID 5EYP. Em ambos os casos, as interações hidrofóbicas proteína-ligante permanecem estáveis, conforme sugerido pelas distâncias -CH... monitoradas entre as cadeias laterais de Val255, Asn258 e Lys352 e os centróides dos anéis fenil e tropolona da colchicina. Na tubulina β II, as interações polares, mediadas por pontes de água de ordem 2, são observadas entre a cadeia principal de Val238 e Cys241 e os oxigênios do grupo trimetoxi da colchicina. Na tubulina β III, essas interações seriam perdidas devido à mutação Cys241Ser, em que o grupo hidroxil da cadeia lateral 241Ser competiria com a água w1' na formação da ligação de hidrogênio. Duas pontes de água de ordem 1 e 3 entre a cadeia principal do resíduo Thr353 e o grupo acetamida da colchicina estão presentes na tubulina β II. Mas em β III essas pontes são menos favoráveis devido à reorganização da colchicina pela perda da ponte com a água w1'. Os resultados obtidos nos ajudarão a desenhar novos fármacos com a capacidade de interagir melhor com diferentes isotipos de tubulina β .

Referências:

1 MCLPUGHLIN, E. C.; O'BOYLE, N. M. Colchicine-binding site inhibitors from chemistry to clinic: a review. *Pharmaceuticals*, v.13,n.4,p.1-43,2020. 2 PARKER, A. L.; TEO, W. S.; MCCARROLL, J. A.; KAVALARIS, M. An emerging role for tubulin isotypes in modulating cancer biology and chemotherapy

resistance. **International Journal Molecular Science** ,v., n.7,p. 1434,2017. 3 STINMETZ, M. O.; PROTA, A. E. Microtubule-targeting agents: strategies to Hijack thye cytoskeleton. **Trends Cell Biology** .,v.28 , n.10, p.776–792,2018..

PG185

Search strategies and phase transitions in the random boolean satisfiability problem

BITTENCOURT, H. D. ; FONTANARI, J. F.

heitor.bittencourt@usp.br

The Boolean Satisfiability Problem (SAT) was the first problem proved to be NP-Complete, which means that it is among the most difficult problems in the complexity class NP.(1) SAT is the task of deciding if a given Boolean formula has a solution, i.e., if it is satisfiable. This work focuses on a random-walk based local search heuristic known as WalkSAT to find a solution to a SAT instance. WalkSAT can also be used to study the phase transition that separates the regime where the random Boolean formulas are almost certainly satisfiable from the regime where they are almost certainly unsatisfiable. What determines whether the SAT is in one or the other regime is the ratio between the number of clauses and the number of logical variables.(2)

Referências:

- 1 KNUTH D. E. **The art of computer programming** .New York: Addison-Wesley,2019. v.4, cap.6.
- 2 SELMAN, B. *et al* . Local search strategies for satisfiability testing. *In* : TRICK, M.; JOHNSON, D. S.(ed.) **DIMACS challenge on cliques, coloring and satisfiability** .Providence: American Physical Mathematical, 1993.

PG186

Route to a two species BEC NaK-39K

GUTIERREZ, E. D. M. ; BAGNATO, V. S.

emmanuel.dv@usp.br

In this work, we present the experimental sequence to produce two species Bose-Einstein condensates (BECs) of sodium and potassium-39 atoms. Following standard sub-Doppler cooling procedures and combining an optically plugged Quadrupole trap (Plug) with a crossed optical dipole trap (cODT), we are able to produce almost pure BECs of sodium with 1×10^6 atoms. (1) The potassium atoms are initially cooled to $18 \mu K$ with the use of a Gray Molasses. Later, about 1×10^8 atoms are transferred to the Quadrupole trap where they will be further cooled by the sodium atoms in a sympathetic cooling procedure. The two species BEC will be finally obtained in the cODT where the interspecies interactions can be tuned with Feshbach resonances (2), enabling the access of miscible and immiscible regimes.(3) As a first evidence of tuning the interactions, we present here the characterization of the Feshbach resonances for the potassium atoms.

Referências:

1 CASTILHO, P. C. M. *et al* . A compact experimental machine for studying tunable Bose-Bose superfluid mixtures. **Laser Physics Letters** , v. 16, n. 3, p. 035501-1-035501-11, 2019. 2 STAN, A. *et al* . Observation of Feshbach resonances between two different atomic species. **Physical Review Letters** , v. 93, n.14,p.143001,2004. 3 SARTORIA, A.; RECATI, A. Dynamics of highly unbalanced Bose-Bose mixtures: miscible vs. immiscible gases. **European Physical Journal D** , v. 67, n..260,p.1-7,2013.

PG187

Holographic superconductors

APRILE, N. ; HARTMANN, B.

nathaprile@usp.br

For the creation of a more realistic model of holographic superconductors, it is necessary to introduce corrections in high orders of curvature on the gravity side. This is done by coupling the Gauss-Bonnet terms to the pure Einstein model.(1) We study holographic superconductors in 3+1 dimension in Einstein Gauss-Bonnet gravity.(2) In this context, we investigate the effect of higher curvature correction with constant coupling negative.

Referências:

1 GREGORY, R.; KANNO, S.; SODA, J. Holographic superconductors with higher curvature corrections. **Journal of High Energy Physics** , v.10, p.010, 2009.DOI: 10.1088/1126-6708/2009/10/010. 2 BRIHAYE, Y.; HARTMANN, B. Holographic superconductors in 3+ 1 dimensions away from the probe limit. **Physical Review D** ,v. 81, n..12,p.126008,2010.

PG188

Study of mixed ions effect in Cs₂O-Li₂O-SrO-P₂O₅ glasses by solid state NMR and impedance spectroscopy

MORGUETTO, G. F. ; SCHNEIDER, J. F.

gabriel.morguetto@usp.br

With the addition of mobile ion to the vitreous matrix, ionic conductivity is introduced in the glass, linearly dependent on the ionic concentration, which makes these materials interesting for applications in batteries and sensors. However, when a second mobile ion is added to the system, strong decrease in the conductivity (1) might be observed, below the expected additive behavior. This phenomenon is known as the mixed ion effect (MIE). The extent of the deviation is usually correlated with the size mismatch between the mixed ions, attaining several orders of magnitude for pairs such as Li-Na or Li-Rb. Other properties of the material dependent on ion diffusion also exhibit nonlinear behavior. A model that tries to explain the MIE is the Random Ion Distribution Model (RIDM) (2), whose hypothesis is the random mixture of mobile species and the presence of structurally different sites of occupation for each ion. To study the validity of the model, a vitreous system with intense MIE (Li-Cs metaphosphate) was disturbed by the addition of a third non-mobile specie (Sr), looking for conditions to inhibit MIE associated with the mixture of alkaline ions, according to the composition rule $(50 - x - y) \text{ Cs}_2\text{O} - x \text{ Li}_2\text{O} - y \text{ SrO} - 50 \text{ P}_2\text{O}_5$, varying x from 0 to 37.5 mol% and y from 0 to 40 mol%. Solid-state NMR, DSC and impedance spectroscopy (IE) techniques were used. With solid-state NMR, we observed linearity in the spectral line FWHM of the nucleus of ⁷Li and ¹³³Cs as a function of their ionic density. For all Li-Cs ratios, we measured linear behaviors, indicating that variations of any of the ions do not affect the dilution of the others, indicative of the random mixture of ions, in accordance with the RIDM. In addition, through IE, we show that MIE is present after the addition of Sr, which acts as blocking ion in the diffusion of Li and Cs, decreasing the conductivity globally and shifting the minimum to the ratio 0.25 Li:Cs.

Referências:

1 ISARD, J. O. The mixed alkali effect in glass. **Journal of Non-Crystalline Solids** , v. 1, n. 3, p. 235-261, 1969. 2 SWENSON, J. *et al* . Random ion distribution model: a structural approach to the mixed-alkali effect in glasses. **Physical Review B** , v. 63, n. 13, p. 132202-1-132202-4, 2001.

PG189

Estudos estruturais, biofísicos e bioquímicos das septinas de levedura Cdc3, Cdc10, Cdc11 e Cdc12

SILVA, R. M. ; GARRATT, R. C.

rafael_msilva@usp.br

Septinas são proteínas estruturais (1) que normalmente apresentam atividade GTPasica, desempenhando um papel importante na estrutura da célula e servindo como um arcabouço no recrutamento de proteínas parceiras. Estas proteínas são encontradas nos mais diferentes tipos de forma de vida, como protozoários, fungos e animais. Para realizar suas funções, as diferentes septinas formam filamentos que são estabilizados por interações entre as subunidades através de dois tipos de interface, chamadas de G e NC. Em levedura quatro proteínas se arranjam de modo a formar um octâmero linear, cuja ordem das proteínas é Cdc11-Cdc12-Cdc3-Cdc10-Cdc10-Cdc3-Cdc12-Cdc11. (2) Este octâmero por sua vez se polimeriza através das suas extremidades com outros octâmeros, dando origem a filamentos de maior complexidade. Compreender os mecanismos moleculares exatos que controlam a montagem correta dos filamentos individuais e posteriormente seu empacotamento em estruturas de ordem superior atualmente representa um dos maiores desafios na área de bioquímica de septinas. Das quatro proteínas mencionadas acima, apenas Cdc11 foi cristalizada e teve a estrutura reportada. (3) Porém, os dados relacionados à esta septina são de muito baixa qualidade, onde se observam sérios problemas de ordem estereoquímica, cristalográfica e estatística. Por este motivo, este projeto buscou re-determinar a estrutura da cdc11 usando o protocolo da literatura e depois estender os estudos estruturais para outras septinas de levedura. Este projeto também analisou propriedades biofísicas das quatro proteínas citadas, como estado monomérico em solução, estabilidade térmica, capacidade de ligar-se a nucleotídeo de guanina e também a hidrólise de GTP.

Referências:

1 HARTWELL, L. H. Genetic control of the cell division cycle in yeast. IV. genes controlling bud emergence and cytokinesis. **Experimental Cell Research**, v. 69, n. 2, p. 265–276. 1971. 2 BERTIN, A.; MCMURRAY, M. A.; GROB, P.; PARK, S.-S.; GARCIA, G.; PATANWALA, I.; NOGALES, E. Saccharomyces cerevisiae septins: supramolecular organization of heterooligomers and the mechanism of filament assembly. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 105, n. 24, p. 8274–8279, 2008. 3 BRAUSEMANN, A.; GERHARDT, S.; SCHOTT, A. K.; EINSLE, O.; GROßE-BERKENBUSCH, A.; JOHNSON, N.; GRONEMEYER, T. Crystal structure of Cdc11, a septin subunit from Saccharomyces cerevisiae. **Journal of Structural Biology**, v. 193, n. 3, p. 157–161, 2016.

PG190

Low-cost disposable screen-printed carbon based electrochemical device for early diagnosis of colorectal cancer

NASCIMENTO, G. ; MATERON, E. M. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.

gustavo.nascimeno@usp.br

The development of methodologies for early diagnosis of colorectal cancer (CCR) is relevant, since this type of cancer is the third in number of deaths in the world. (1) In this study, we developed an electrochemical biosensor to detect the bacterium *Fusobacterium nucleatum* (*F. nucleatum*), a microorganism whose strong relationship with CCR was recently discovered. (2) Specific DNA sequences for the recognition of *F. nucleatum* were immobilized in magnetic particles (MPs) for sample preconcentration and employed in the detection. Disposable devices based on carbon printed electrodes were used for the specific recognition of biomarkers with electrochemical techniques. Among the advantages of this system is the use of small sample volumes, possibility of miniaturization and rapid analysis, which can generate a low-cost system for the early detection of CCR. To prove the efficiency of the detection, square-wave voltammetry (SWV) technique was applied to provide a comparison between the changes that occur in the surface of the MPs during the process of construction and detection. The proposed devices could detect the presence of complementary DNA down to 1 μM in buffer solution with good correlation (RSD = 7%).

Referências:

- 1 LIM, J. M. *et al* . Electrochemical peptide sensor for diagnosing adenoma-carcinoma transition in colon cancer. **Biosensors and Bioelectronics** , v. 98, p. 330-337, Dec. 2017. DOI 10.1016/j.bios.2017.07.013.
- 2 BULLMAN, S. *et al* . Analysis of *Fusobacterium* persistence and antibiotic response in colorectal cancer. **Science** , v. 358, n. 6369, p. 1443-1448, Dec. 2017.

PG191

Diagnóstico precoce e não invasivo de tumor usando nanosensores responsivos

SILVA, E. C. ; ZUCOLOTTI, V.

erica.corina@usp.br

Nanossistemas inteligentes capazes de localizar pequenas lesões tumorais, responder a estímulos fisiológicos do microambiente do tumor e, com isso, sinalizar a presença de câncer são uma alternativa de diagnóstico precoce e não invasivo.(1)Este projeto visa construir um nanossensor responsivo (2) à atividade enzimática de metaloproteinases da matriz celular externa no microambiente do tumor; otimizar a especificidade do nanossensor, diminuindo a resposta a proteases não envolvidas com o avanço do tumor; desenvolver uma plataforma de diagnóstico, integrando o nanossensor a um dispositivo de imunensaio de fluxo lateral; e validar a nova plataforma, comparando-a com um teste de diagnóstico por biomarcadores com a expectativa de que detecte o tumor precocemente.(3)

Referências:

1 ETZIONI,A. *et al* . The case for early detection. **Nature Reviews Cancer** ,v.3, n.4, p.243-252, 2003. 2 KWON, E. *et al* . Ultrasensitive tumour-penetrating nanosensors of protease activity. **Nature Biomedical Engineering** , v.1, n.0054,2017.DOI .10.1038/s41551-017-0054. 3 HORI, S. *et al* . Mathematical model identifies blood biomarker-based early cancer detection strategies and limitations. **Science Translational Medicine** , v.3, n.109,p.109ra16,2011.

PG192

Bose-Einstein condensates and pseudo-potentials in bubble traps

BIRAL, E. ; BAGNATO, V. S. ; SANTOS, F.

eliasbiral@usp.br

Bose-Einstein condensation (BEC) is a very important phenomenon which has become an area of great interest both theoretically and experimentally. Such a phase is defined as the situation where there is a macroscopic number of particles sharing the same 1-particle quantum state so that they can be described by the same quantum wave function. BEC has many interesting properties, but one which stands out is the appearance a pseudo-potential due to a geometric deformation on the trapping manifold. (1) The true theoretical aspects of this pseudo-potential are somehow related to the curved nature of the manifolds in which the trapping stands in real space. In BEC, the pseudo-potential nature is far from being investigated. With the growing use of cold atoms to design BEC many different models and experimental setups have appeared on the literature, in particular, the bubble trap shaped potential has been of great interest. (2) The behavior of pseudo-potentials in relation to physical parameters still presents challenges in regard to the theoretical description, in special to the case of the BEC on the bubble trap. The reason RF-dressed potentials called so much attention from experimentalists is that they are very adjustable and smooth. The high level of control in these experiments allow for the building of many different complex trap geometries. The bubble can be produced using a radiofrequency field in an adiabatic potential based on a quadrupolar magnetic trap. Here, we used both numerical and direct integration methods for the theoretical investigation of the system. Basically, the direct integration studies consist on the energy minimization in relation to the variation parameters, while the numerical ones are based on the direct solution of the time-independent Gross-Pitaevskii equation (GPE). This was an important training ground for learning the techniques that will be applied in future works. We also plan to use variational analytical methods with the Gross-Pitaevskii functional in conjunction with real-time three-dimensional long-scale simulations (3) to study these pseudo-potentials on the bubble trap BEC. In this way, we seek to contribute with a robust theoretical base in a cutting-edge field that maintains significant contact with current experiments.

Referências:

1 MÖLLER, N. S. *et al* . Bose-Einstein condensation on curved manifolds. **New Journal of Physics** , v. 22, n. 6, p. 063059, 2020. 2 HERVE, M. G. **Superfluid dynamics of annular Bose gas** . 2018. 224 f. Thesis (Docteur Physique) - Laboratoire de Physique des Lasers, Université Sorbonne, Paris, 2018. 3 CIDRIM, A. *et al* . Vortices in self-bound dipolar droplets. **Physical Review A** , v. 98, n. 2, p. 023618, 2018

PG193

Correntes de Wigner e quantificadores de não-classicalidade

SILVA, C. F. ; BERNARDINI, A. E.

caiofernandoesilva@gmail.com

Dentro do escopo da formulação usual da Mecânica Quântica, na qual um sistema é descrito a partir de uma função de onda, uma conexão com o limite semi-clássico deixa de ser evidente. De fato, os diversos problemas interpretativos dessa teoria já conhecidos levam a aparentes contradições que sobrevivem até os dias atuais. Tais questões podem ser contornadas na formulação de Weyl-Wigner, a qual introduz funções escalares no lugar dos operadores usuais do espaço de Hilbert. Esse mapeamento introduz uma álgebra não-comutativa que evidentemente preserva os postulados da teoria, mas garante uma manipulabilidade da função de Wigner característica, equivalente ao operador densidade do sistema, ou ainda, à função de onda para sistemas puros. Esses aspectos qualitativamente novos são adicionados à teoria como uma consequência puramente matemática, dado que a evolução do sistema é descrita por uma espécie de projeção da equação de Schroedinger no espaço de fases (1), elevando a teoria quântica a um *framework* similar ao da Mecânica Clássica. Com efeito, a equação de continuidade obtida para o *ensemble* quântico estabelece uma conexão explícita com a Mecânica dos Fluidos, na qual as correntes de Wigner transportam o conteúdo informacional do sistema quântico, ao passo que a função de Wigner aparenta desempenhar o papel de uma densidade de probabilidades. Mais especificamente, a interpretação da função de Wigner como uma densidade de probabilidade tem origem na estrutura da sua equação de continuidade, a chamada equação de *Liouville* quântica (1), a qual generaliza a equação homônima para sistemas Hamiltonianos. No entanto, aspectos inerentemente quânticos à teoria fazem com que a função de Wigner possa assumir valores negativos, preservando assim os aspectos unitários. Desta forma, ao explorar esses e outros aspectos de não-classicalidade dentro da analogia com o movimento de fluidos, observa-se que as correntes de Wigner podem apresentar flutuações quânticas, que estão relacionadas a não-harmonicidade do potencial quântico, isto é, é uma característica de não-linearidade na equação de movimento do *ensemble*. (2) Essas flutuações podem ser facilmente identificadas no retrato de fases, dado que um sistema *Liouvilliano* é linear e apenas produz rotações no espaço de fases. Por outro lado, um sistema quântico possui uma assinatura particular, a formação de pontos de estagnação que induzem vórtices nas correntes de Wigner, dada a continuidade da função de onda e, conseqüentemente, das correntes obtidas. Em geral, esses efeitos locais no espaço de fases têm efeitos globais no fluxo de Wigner, de forma que para sistemas periódicos, pode-se quantificar o efeito resultante dos múltiplos vórtices a partir do sistema clássico correspondente. (2-3) Pragmaticamente, a formação dos pontos de estagnação afeta os aspectos informacionais do sistema, como a produção de pureza ou entropia definidas dentro desse mesmo *framework*. (3) Portanto, a caracterização do conteúdo de informação quântica de um sistema, quando descrito a partir da função de Wigner e suas correntes, permite identificar a emergência de um regime semi-clássico.

Referências:

1 KAKOFENGITIS, D.; OLIVA, M.; STEUERNAGEL, O. Wigner's representation of quantum mechanics in integral form and its applications. **Physical Review A**, v. 95, n. 2, p. 022127-1-022127-4, Feb. 2017. 2 SILVA, C. F.; BERNARDINI, A. E. Classical and statistical limits of the quantum singular oscillator. **Physica A**, v. 558, p. 124915, Nov. 2020. 3 BERNARDINI, A. E. Testing nonclassicality with exact Wigner currents for an anharmonic quantum system. **Physical Review A**, v. 98, n. 5,

p. 052128-1-052128-11, Nov. 2018.

PG194

Utilizando o aprendizado de máquina para análise de órbitas caóticas

LUCHESI, A. C. F. ; BRUNO, O. M.

O mapa logístico consiste em uma relação de recorrência proposta pelo físico Robert May como um modelo simples para descrever um crescimento populacional, $x_n = x_{n-1}R(1 - x_{n-1})$ (1). Esse sistema determinístico apresenta sensibilidade às condições iniciais para certos valores do parâmetro R, o que o leva a um comportamento caótico após um certo número de iterações. Devido à sua simplicidade, o mapa logístico é uma das equações mais estudadas quando se tratam sistemas complexos e teoria do caos. Uma das consequências do comportamento de sistemas caóticos é que sua previsão a longo prazo se torna impossível. No entanto, o surgimento de redes neurais recorrentes do tipo Echo State possibilitou prever o futuro de séries temporais caóticas com acurácia 2400 vezes superior a outros métodos (2), além de obter, com pequeno erro, o futuro do sistema de Kuramoto-Sivashinsky por até oito tempos de Lyapunov. (3) Nas últimas décadas, o aprendizado de máquinas com redes neurais artificiais tem se mostrado uma das mais poderosas ferramentas para a resolução dos mais diversos problemas, como detecção de objetos em imagens e tradução de textos. As redes neurais recorrentes possuem a propriedade de manter memória de entradas anteriores e, por conseguinte, são as mais indicadas quando sequências e séries temporais estão sendo analisadas. Nesse contexto, nosso objetivo é, além de estudar os métodos para prever o futuro do mapa logístico, investigar como essas previsões podem se relacionar com propriedades desse sistema.

Referências:

1 MAY, R. M. Simple mathematical models with very complicated dynamics. **Nature**, v. 261, p. 459-467, June 1976. 2 JAEGER, H.; HAAS, H. Harnessing nonlinearity: predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication. **Science**, v. 304 n. 5667, p. 78-79, May 2004. 3 PATHAK, J. *et al*. Model-free prediction of large spatiotemporally chaotic systems from data: a reservoir computing approach. **Physical Review Letters**, v. 120, n. 2, p. 024102-1-024102-5, Jan. 2018.

PG195

Emulador para o espectrômetro digital do CIERMag

MARTINS, M. J. ; TANNUS, A. ; VIDOTO, E. L. G. ; SOUZA, P.

A Ressonância Magnética Nuclear (RM) é uma técnica bastante importante e versátil, pois permite que, de forma não invasiva, sejam observadas e analisadas as substâncias presentes no corpo de teste, seja ele uma amostra inanimada ou um ser vivo. Contudo, a técnica é bastante complexa, necessitando de equipamento de alta tecnologia e nenhum dos equipamentos comerciais disponíveis atendem idealmente a área de Pesquisa que desenvolve novos métodos e sequências de pulsos. Diante deste contexto, o Grupo de Pesquisas do Centro de Imagens e Espectroscopia in vivo por Ressonância Magnética (CIERMag) desenvolveu um Espectrômetro em FPGA (1-2) voltado para pesquisas científicas, que pode ser configurado para operar, idealmente, em qualquer experimento de RMN e também pode ser atualizado para auxiliar o desenvolvimento de novas sequências de pulsos. O objetivo deste trabalho é desenvolver um emulador para o Espectrômetro com as mesmas características e arquitetura, de modo que possa substituir completamente o equipamento físico. Deste modo, será possível realizar testes tanto dos softwares presentes no ambiente de operação do Espectrômetro, quanto das novas sequências de pulsos. O emulador oferecerá recursos de trabalho que não são acessíveis dentro do hardware como visualização da memória e dos registradores dos processadores, acompanhamento passo-a-passo da execução dos códigos dos processadores, monitorar as saídas e formas de onda gerados. Atualmente, o Emulador contém a interface UDP para ser possível realizar a comunicação com o usuário. O Carregador também está implementado, de modo que, por meio de comandos enviados utilizando a interface UDP, o Emulador pode, por exemplo, ler e escrever dados nas memórias dos demais processadores, iniciar ou parar a execução em todos os processadores. No momento está em desenvolvimento o conjunto de instruções juntamente com a classe genérica que dará origem a todos os processadores.

Referências:

1 TANNÚS, A.; PIZETTA, D. C.; SILVA, D. M. D. D; VIDOTO, E. L. G; MARTINS, M. J. Subistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados de espectrômetro digital de RM: ToRM console. Processo: BR512015001485-4. Data de registro: 07 dez. 2015. **Revista da Propriedade Industrial - RPI** n. 2365, p. 350, item 120. Registro de software. 2 SILVA, D. M. D. D.; PIZETTA, D. C.; FREIRE, G. M.; COELHO, F. B.; LOURENÇO, G. V.; CORRÊA, R. R. M.; MARTINS, M. J.; VIDOTO, E. L. G.; TANNÚS, A. Subistema multiplataforma para controle de aquisição, visualização e organização de dados do Espectrômetro Digital de RM: ToRM console. **Revista Brasileira de Física Médica** , v. 7, n. 2, p. 35-40, 2013.

PG196

Desenvolvimento e validação de biossensores portáteis de baixo custo de anticorpo ou DNA para diagnóstico de doenças – dengue

CAMARGO, M. A. D. ; GONÇALVES, D.

maria_angelica@usp.br

Apesar dos avanços tecnológicos ao redor do mundo e nas mais diversas áreas, os países em desenvolvimento ainda enfrentam inúmeros desafios na área da Saúde. Além de lidar com as doenças mais comuns, tais como obesidade, diabetes e câncer, os países em desenvolvimento ainda enfrentam o aparecimento de doenças que são evitáveis ou passíveis de tratamento em países desenvolvidos. Nos países em desenvolvimento, os diagnósticos clínico e laboratorial geralmente são limitados e inacessíveis para a maioria dos pacientes, o que pode resultar em altas taxas de mortalidade por conta de doenças negligenciadas>. (1) Uma alternativa promissora no cenário de diagnóstico é o uso de biossensores devido a características de simplicidade, precisão e alta sensibilidade. Apesar dos crescentes avanços na área acadêmica em relação aos biossensores, visando aumentar a sensibilidade da técnica e torná-la mais barata, ainda não existem no mercado testes comerciais utilizando essa metodologia. O objetivo geral deste trabalho é o desenvolvimento de biossensores de anticorpos e de DNA para a detecção de marcadores do vírus da dengue baseados em eletrodos interdigitados impressos. Para isso serão fabricados eletrodos interdigitados utilizando a metodologia descrita por IBAÑEZ-REDÍN e estes serão modificados utilizando filmes nanoestruturados de nano-onions de carbono (CNOs) e óxido de grafeno (GO). (2) Será fabricada uma camada bioativa por imobilização de anticorpos proteicos e sondas biotiniladas de DNA com fita única específica (complementar) para regiões promotoras de genes de interesse sobre os filmes nanoestruturados. Os filmes nanoestruturados e as unidades sensoriais serão caracterizados por técnicas de espectroscopia eletrônica e vibracional (UV-Vis, FT-IR, espalhamento Raman e geração por soma de frequências – SFG e PM-IRRAS), técnicas de microscopia e nanogravimetria. Em seguida será feita a detecção dos analitos de interesse (biomarcadores proteicos e DNA) por medidas de impedância elétrica, impedância eletroquímica, PM-IRRAS e detecção dos biomarcadores em amostras clínicas de soro ou sangue. Por fim, será feita a otimização da técnica e dos reagentes utilizados na preparação da amostra e execução da técnica a fim de torná-la mais simples e rápida, compatível a um POC. Ao final do projeto espera-se a obtenção de um teste point-of-care específico, seletivo, sensível e de baixo custo. A tecnologia baseada em biossensores surge como uma alternativa promissora e elegante para sanar as deficiências e limitações das técnicas diagnósticas disponíveis hoje no mercado mundial. (3)

Referências:

1 SHARMA, S. *et al* . Point-of-care diagnostics in low resource settings: present status and future role of microfluidics. **Biosensors** , v. 5, n. 3, p. 577-601, 2015. 2 IBAÑEZ-REDÍN, G. *et al* . Screen-printed interdigitated electrodes modified with nanostructured carbon nano-onion films for detecting the cancer biomarker CA19-9. **Materials Science and Engineering C** , v. 99, p. 1502-1508, 2019. DOI: 10.1016/j.msec.2019.02.065. 3 FARIA, A. M.; MAZON, T. Early diagnosis of Zika infection using a ZnO nanostructures-based rapid electrochemical biosensor. **Talanta** , v. 203, p. 153-160, 2019. DOI: 10.1016/j.talanta.2019.04.080.

PG197**Anderson localization in natural photonic crystals**

MATTOS, V. S. ; BAGNATO, V. S. ; CASTRO NETO, J. C. ; BARRERA-PATIÑO, C. P.

vicente.mattos@usp.br

A theoretical and experimental study of optical and structural properties in natural photonic crystal is studied here. Iridescent phenomena, the property on materials to reflect different colours according to the angle of observation, is present in different insect species from Colombia and Brazil. (1) Wings of *Morpho cypris* and *Greta oto* butterflies and *Carineta fasciculata* (Brazilian cicada) exhibit iridescent effects, and it is related to the nano-arrays of the structural colored surfaces. The theoretical modeling starts with the study of the ordered system, with the goal to obtain the photonic band gap (PBG) of the natural photonic crystal. This modelling will be analyzed in conjunction to optical properties measured in order to find the active region in the visible range of electromagnetic spectrum. The development of model starts from a scanning electronic microscopy measurements of the wings samples, this method allows the work with the correct array size in one and two dimensional photonic crystal simulation model.(2) The study continues with the introduction of random disorder into the modeled photonic system in order to find the effect that have the structural disorder into the photonics properties of the system. The inherent disorder that exposes these materials is analyzed in the context of Anderson's localization.(3) Besides, this work aims to measure Anderson's localization on cicada and butterflies wings using a Single Shot Autocorrelator (SSA from Coherent) and a femtosecond pulsed laser (Libra laser of 450 mW, 1KHz of frequency and wavelength of 850 nm from Coherent). Here we are focused on understanding iridescence and the effect of disorder in nature photonic structures without changing any aspect of the samples. The results can bring a support into the implementation of photonics technologies in biomaterials to industrial development. The experimental setup were based on placing the cicada and butterfly wings in the optical path of the laser before and inside the SSA. The SSA has two paths: a fixed and a moving path, and we placed the wings in both of them. This were made in order to obtain a signal of autocorrelation between a splitted laser beam and the correlation between one original laser beam and the other one that crossed the cicada and butterfly wings. With this study we want to determinate the measurement of time delay due to the interaction of the laser and the photonic natural structures, because when the laser beam crosses the sample, it changes the optical path in relation with the first without interaction. Due to the high precision required on this measurement we developed a tested analysis, with different samples like glass blades. The preliminar results about the autocorrelation and pulse width are been analysed.

Referências:

1 VUKUSIC, P.; SAMBLES, J. R. Photonic structures in biology. **Nature** , v. 424, n. 6950, p. 852-855, 2003. 2 MEADE, R. D.; WINN, J. N.; JOANNOPOULOS, J. D. **Photonic crystals** : molding the flow of light. Princeton: Princeton University Press, 1995. 3 BARRERA-PATIÑO, C. P. *et al* . Photonic effects in natural nanostructures on *Morpho cypris* and *Greta oto* butterfly wings. **Scientific Reports** , v. 10, n. 1, p. 1-11, 2020.

PG198

Majorana Fermions in topological-insulators/superconductor heterostructures

PUPIM, L. ; EGUES, C.

lucas.pupim@usp.br

The unique features of Majorana fermions make them strong candidates as robust qubits for topological quantum computing. Recent experimental results concerning these distinctive fermions by He et al. (1), which has been challenged by Kayyalha et al. (2), motivates this project. We look at a heterojunction comprising a topological superconductor strip sandwiched between two layers of topological insulators. We investigate quantum transport by calculating the conductance of the system and trying to assess the relevance of Majorana physics to the recently reported experimental results. Here we introduce the system and present some preliminary results, e.g., as Andreev processes for a semi-infinite topological insulator/topological superconductor junction.

Referências:

1 HE, Q. L. *et al* . Chiral Majorana Fermion modes in a quantum anomalous hall insulator–superconductor structure. **Science** , v. 357, n. 6348, p. 294-299, 2017. 2 KAYYALHA, M. *et al* . Absence of evidence for chiral Majorana modes in quantum anomalous hall-superconductor devices. **Science** , v. 367, n. 6473, p. 64-67, 2020.

PG199

Engenheiro de ecossistema

LOPES, G. ; FONTANARI, J. F.

guilherme2.lopes@usp.br

O ser humano possui a habilidade de modificar o seu ecossistema para conseguir recursos para sua sobrevivência. Essa exploração tornou-se inadequada devida ao crescimento populacional, seguido do desenvolvimento de novas tecnologias de exploração. As discussões se a população pode ou não entrar em colapso devido a alta taxa de exploração dos recursos naturais são antigas e permanecem abertas. Contrastando com a abordagem usual para modelar as interações homem-natureza, que são baseadas no modelo predador-presa de Lotka-Volterra com os seres humanos como os predadores e a natureza como a presa, aqui abordamos essa questão usando um modelo de dinâmica populacional de engenheiros de ecossistemas em tempo discreto. Na modelagem de engenheiros de ecossistemas, consideramos que o organismo (engenheiro) modifica um habitat virgem (florestas), transformando-o em habitat utilizável (lavouras). Durante a exploração, o habitat sofre um processo de degeneração tornando-se degradado (deserto). Eventualmente, o habitat degradado regenera-se, voltando a ser um habitat virgem novamente. Neste trabalho, a população de engenheiros de ecossistemas é modelada pela equação de Beverton-Holt com a capacidade de suporte do ambiente dependente da densidade de habitats utilizáveis. Na situação em que a regeneração é lenta, a dinâmica da população é dominada por ciclos de prosperidade e colapso. Contudo, o aumento da eficiência de exploração dos habitats virgens (ou seja, menos organismos para produzir o mesmo número de habitats utilizáveis) estabiliza a dinâmica, levando a um estado estacionário estável. Em futuros estudos, o sistema será abordado no contexto de mapas acoplados, que consistem em uma discretização do tempo e do espaço. (1)

Referências:

1 LOPES, G. M.; FONTANARI, J. F. Influence of technological progress and renewability on the sustainability of ecosystem engineers populations. **Mathematical Biosciences and Engineering** ; v. 16, n. 5, p. 3450-3464, 2019.

PG200

Estudos estruturais e funcionais em Xilose Isomerase

BRIGANTI, L. ; MANZINE, L. ; POLIKARPOV, I.

lorenzo_briganti@outlook.com

Durante os últimos anos a chamada Química Verde vem contribuindo de maneira significativa para a produção industrial de alimentos, bebidas, energética, de produtos químicos, entre outros. A indústria sucroalcooleira, por exemplo, apesar de tradicional e bem-estabelecida no Brasil, possui um grande desafio: Aumentar a produção de etanol melhorando o rendimento do processo e utilizando os rejeitos gerados, como o bagaço da cana-de-açúcar. Atualmente, uma tonelada de cana gera, aproximadamente, 90 L de etanol e 280 Kg de bagaço. (1) Apesar de existirem pesquisas de melhoramento genético do vegetal para aumentar a produção de caldo, o bagaço produzido continua sendo sub-aproveitado na indústria. Uma das estratégias estudadas é através da produção de Etanol de 2ª geração, ou seja, produzido à partir de sobras da produção primária (como bagaço, palha e pontas do vegetal). No bagaço, por exemplo, cerca de 28% da sua constituição é hemicelulose, cujo composto majoritário é a xilose.(2)A Xilose é uma aldose que não é fermentada naturalmente por *Saccharomyces cerevisiae*. Isto significa que é necessária a conversão de Xilose a Xilulose (Cetose) para que a fermentação ocorra. Essa conversão se dá através da enzima Xilose Isomerase (XI) (3), presente em diversos organismos. O objetivo do presente estudo foi identificar e caracterizar bioquímica, biofísica e estruturalmente uma XI com potencial interesse industrial, ou seja, de pH e temperatura ótimos com valores semelhantes ao encontrado no processo produtivo agroindustrial.

Referências:

1 RENEWABLE FUELS ASSOCIATION. Disponível em: www.ethanolrfa.org. Acesso em 20.09.2020. 2 REZENDE, C. A.; LIMA, M. A.; MAZIERO, P.; DE AZEVEDO, E. R.; GARCIA, W.; POLIKARPOV, I. Chemical and morphological characterization of sugarcane bagasse submitted to a delignification process for enhanced enzymatic digestibility. **Biotechnology for Biofuels** , v. 4, p. 54. 2011. 3 ASBÓTH, B.; NÁRAY-SZABÓ, G. Mechanism of action of D-xylose isomerase. **Current Proteins Peptides Science** , v.1,n.3, p. 237-254 2000.

PG201

Hamiltoniano por formalismo k-p para estruturas Zinblende

OLIVEIRA, C. E. D. ; SIPAHI, G. M.

caio.physics017@gmail.com

Uma das mais importantes áreas da física do estado sólido é o estudo de redes cristalinas. Define-se cristais como estruturas as quais o ordenamento atômico é descrito através de um arranjo periódico, os elétrons no interior do material podem ser descritos por meio do teorema de Bloch.(1)Podemos fazer uso da teoria de grupos, que nada mais é que o uso da simetria, para simplificar o tratamento do problema.(1-2) Uma das bases para o uso de tal técnica está no fato de que Hans Bethe, em 1929, utilizou teoria de grupos para analisar de estruturas cristalinas. Esse trabalho apresenta a construção do Hamiltoniano k-p 14×14 no ponto Γ para as estruturas cristalinas zinblende baseado no formalismo da teoria de grupos. A ideia consiste em utilizar o grupo de simetria do ponto Γ para obter as representações irreduzíveis das bandas de energia partindo de orbitais atômicos. Usaremos como ponto de partida o já consolidado Hamiltoniano 8×8 (1) para zinblende e através do método dos invariantes simplificaremos a descrição do sistema, isso nos permitirá incluir um novo conjunto de seis bandas de energia, resultando no Hamiltoniano 14 bandas.

Referências:

1 INUI, T.; TANABE, Y.; ONODERA, Y. **Group theory and its applications in physics** . Berlin: Springer-Verlag, 1990. 2 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. **Group theory : application to the physics of condensed matter**. Berlin: Springer-Verlag, 2008.

PG202

Spin transfer torque at topological insulator/ferromagnetic metal interfaces

ZANON, J. ; EGUES, C.

julianzanon@ifsc.usp.br

Two-dimensional topological insulators interfaced with ferromagnetic layers offer a unique setting to investigate spin transfer torque due to spin-momentum locked edge states. (1-2) We combine a minimal lattice tight-binding Bernevig-Hughes-Zhang model and linear response theory to calculate the band structure, spin textures, charge and spin current. The finite difference method is also applied to corroborate the calculations above. Our preliminary results are consistent with reference.(3) We are now exploring the parameter space of the model to find interesting and novel results. We acknowledge funding from CAPES, CNPq and FAPESP.

Referências:

1 VAN VLIET, . M.J. A. **Topological insulators** : tight-binding models and surface states 2019.61p.Thesis(Doctor in Applied Physics) - University of Twente, Drienerloaran,2019. 2 MANCHON, A. *et. al* . Current-induced spin-orbit torques in ferromagnetic and antiferromagnetic systems. **Reviews of Modern Physics** , v.91, p.035004, 2019. 3 ZEGARRA, A.; EGUES, J. C.; CHEN, W. Persistent currents and spin torque caused by percolated quantum spin hall state. **Physical Review B** , v.101, n.22, p.224438, 2020.

PG203

Using neural networks to forecast stock prices using simulated data

SOUZA, H. R. D.

humberto.souza@usp.br

This project is focused on using neural networks architectures in the forecast of stock prices, with its main contribution being the creation of a simulated dataset, aimed in investigating its effectiveness when applied in real stock prices of assets located in BOVESPA. To generate this simulated data, it was used coupled stochastic processes that are commonly used in this field (1), following this stochastic differential equations:

$$dx = \mu dt + \sigma dW_1$$
$$d\sigma = \alpha(x, \sigma)dt + \beta(x, \sigma)dW_2$$

Where x is the return of an invested amount and σ is the volatility of an asset, which is also considered as a stochastic variable in this model.

Our goal is to create a well structured open-source dataset with this model, then create a multi-task agent with its data, to solve problems such as forecasting real stock prices and estimation of the model parameters, to foment the creation of a robust model to use in transfer learning tasks, motivated in the huge success that language models had in this area in recent years.

Referências:

1 HESTON, S. L. A closed-form solution for options with stochastic volatility with applications to bond and currency options. **Review of Financial Studies**, v. 6, n. 2, p. 327-343, 1993.

PG204

Topological insulator/ferromagnetic metal junctions

ARAUJO, R. D. N. ; EGUES, C.

ronaldonasaraujo@gmail.com

Oscillatory edge states in topological insulators with mexican hat bands have been predicted in GaAs/Ge/GaAs quantum wells. (1) Here we calculate the electronic properties of a junction between a topological insulator in the mexican hat regime and a ferromagnetic metal via the tight-binding method.(2) We use linear response theory to determine the current and magnetoelectric susceptibility in the presence of disorder. Due to the coupling between the materials, a local laminar flow of persistent charge and spin currents occur near the interface. In the presence of an electric field the linear current induces a spin polarization, mainly in the z-direction, which is enhanced near the impurities. These results are consistent with an earlier theoretical calculation. (3) We are currently extending this previous calculation to other types of junctions such as: 2D surface states of a 3D topological insulator coupled to a ferromagnet metal and 2D topological insulator with a superconductor. We acknowledge financial support from CAPES, CNPq and FAPESP.

Referências:

1 ZHANG, D.; LOU, W.; MIAO, M.; ZHANG, S.; CHANG, K. Interface-induced topological insulator transition in GaAs/Ge/GaAs quantum wells. **Physical Review Letters** , v.111, n.15,p.156402, 2013.
2 BERNEVIG, A.; HUGHES, L. ;ZHANG, C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. **Science** , v.314, n. 5806, p.1757, 2006. 3 ZEGARRA, A.; EGUES, J. C.; CHEN, W. Persistent currents and spin torque caused by percolated quantum spin hall state. **Physical Review B** , v.101, n.22, p.224438, 2020.

Índice de Autores

A	
ABEGAO, L.	93, 98
ABREU, F. M. O.	244
AFONSO, R.	169
AGUIAR, A. C. C.	118, 140, 250
AHMAD, A.	250
AKIYAMA, J.	62, 69
ALMEIDA, G. F. B. D.	238
ALMEIDA, I. C. D.	40, 146
ALMEIDA, J.	33
ALMEIDA, L. B. D.	61
ALMEIDA, L. R. D.	282
ALVARENGA, J. P. D. V.	58
ALVES, G. A. S.	245
ALVES, H.	103
ALVES, J.	67
AMBROSIO, A.	81, 219, 244
ANDRÉ, I.	173
ANDRADE, B. R. V. D.	88
ANDRADE, E.	146, 156, 251
ANDRADE, L.	208
ANDRADE, M. B. D.	100, 238
ANDREETA, M.	133
ANDRICOPULO, A. D.	86, 210, 212, 266, 292
ANTONIO, L. C.	114
APRILE, N.	296
ARAÚJO, A. P. U. D.	47
ARAÚJO, E. A. D.	144
ARAI, M.	59
ARAUJO, A.	85
ARAUJO, A. P.	255
ARAUJO, G.	166
ARAUJO, R. D. N.	278, 314
ARBELETCHÉ, L.	186
ARGENTIN, M. N.	126
ASNIS, Y.	37
AUDI, G.	240
AVÓ, L. R. D. S. D. 201	
AYALA, E. T. P. 276	
B	
BACHELARD, R. 95, 101	
BAGNATO, V. S. 63, 68, 77, 108, 143, 175, 201, 202, 204, 237, 253, 257, 263, 264, 276, 291, 295, 301, 307	
BARBOSA, C. D. S. 250	
BARBOSA, M. G. 247	
BARBOSA, P. S. 118	
BARENGHI, C. 108	
BARRA, A. L. C. 161	
BARRERA-PATÍÑO, C. P. 307	
BASILE, D. 73	
BELLINI, B. S. 61	
BELTRAMINI, L. M. 112	
BENATTI, A. 105	
BERETA, S. 178	
BERNARDINI, A. E. 302	
BESSE, R. 258	
BIRAL, E. 301	
BISPO JUNIOR, A. G. 256	
BITTENCOURT, H. D. 294	
BLANCO, K. C. 66, 73, 143, 263	
BLOSSOM, B. M. 144	
BOITO, D. 106, 107, 110, 239	
BONAGAMBA, T. J. 133, 165	
BONANI, F. 103	
BONI, L. D. 35, 52, 62, 69, 71, 96, 98	
BORALLI, C. M. D. S. 54, 159	
BORGES, L. 101	
BORIN, D. 172	
BOSSOLAN, N. R. S. 126, 131	
BOTTI, L. 75	
BRAMBILLA, G. 59	
BRANDÃO-NETO, J. 255	

BRAZ, D. C.	198	COSTA, F. R. F. D.	86
BRIGANTI, L.	144, 310	COSTA, J. N. Y.	30
BRITO, F. B. D.	82, 190, 206	COSTA, L. D. F.	99, 124, 181, 199, 254
BROGNARA, G.	255	COURTEILLE, P.	101, 231, 275
BRUNO, O. M.	58, 188, 203, 256, 304	COUTO, F.	76
BURTOLOSO, A. C. B.	250	CUNHA, É. F. D.	181
BUZZÁ, H. H.	63, 68, 175, 204	CURVELO, K.	36
C		D	
CABREJOS, D. A. L.	147, 173, 226	D'ALMEIDA, C. D. P.	79, 84, 272
CALDERÓN, G. L.	102	DABUL, A. N. G.	236
CAMARGO, A. D.	59, 249	DAMASCENO, H. R.	130
CAMARGO, I.	54	DANTAS, L.	194
CAMARGO, I. L. B. D. C. .	112, 159, 214, 236	DIAS, L.	142
CAMARGO, M. A. D.	306	DIAS, P. G. S.	231
CAMPOS, C. D. P.	43	DIAS, S. M. G.	219, 244
CANAL, G.	37	DINIZ, G.	221
CAPITÃO, R.	118, 140	DINIZ, P.	286
CAPOBIANCO, R.	141	DOMINGUES, G. S.	99
CAPRETZ-AGY, A.	210	DONATO, M. H. F.	137
CARACANHAS, M. A.	119, 182	DOURADO, R.	123, 183
CARDOSO, C.	157	DRINKO, A.	230
CARMO, R. S. D.	104	DUZZIONI, E. I.	90
CARVALHO, F. K. D.	179	E	
CASTILHO, P. C. M.	202, 237, 253	ECKERT, H.	130, 271
CASTILHO, R. R.	225	EGUES, C.	278, 308, 312, 314
CASTRO NETO, J. C.	40, 145, 179, 307	ESQUÉN, P. I. H.	159, 214
CENTURION, H. A.	189	EVANS, T.	37
CERQUEIRA, M. C.	262, 274	F	
CESARINO, V.	289	FACIOLI, M.	47
CHAVIGURI, J. R. H.	182	FARIA, C.	77, 201
CHEROBIN, E.	220	FARIA, G.	92, 170, 243
CILLI, E. M.	112	FARIA, W.	249
CLABEL, J. L.	88	FARIAS, K. M.	202, 237, 253
COCCA, L. Z.	93, 96, 98	FEITOSA, P.	84
COELHO, B. S.	149	FERNANDES, A.	147
COELHO, F.	210	FERNANDES, F. S.	210
COLUCCI, R.	92	FERNANDEZ, M. F.	231
COMIN, C. H.	99	FERRARI, A. L.	184
COMPARETTI, E.	242	FERRAZ, M.	116
CONSOLE, F.	223	FERREIRA, C. H. G.	60, 115
CORREA, A. D. S.	268	FERREIRA, F.	128
CORREIA, C. R.	118	FERREIRA, G. C.	68
CORSI, L.	152	FERREIRA, J. D. F.	131
CORTEZ, A.	136	FERREIRA, L. A.	155, 270
COSTA FILHO, E. da	209	FERRERIA, C. T. T.	248
COSTA, C.	77		

FIUSA, G.	34	HOYOS, J.	215
FOERSTER, B. U.	133	HUERTA, H. M.	225
FONTANARI, J. F.	44, 83, 122, 294, 309	I	
FONTOLAN, L. S. B.	89	IERMAK, I.	43
FORTES, G.	260	INADA, N. M. 63, 142, 175, 185, 204, 257, 291	
FORTUNATO, T. C.	196	ISRAEL, I.	290
FRANÇA, B. A.	144	J	
FREIRE, M. C. L. C.	116, 224	JASINEVICIUS, G. O.	63, 175
FURUTA, R. H. M.	199	JOCHELAVICIUS, K.	265
G		JORGE, G. H. A.	64
GÁMEZ, Y. M.	291	JUCOVSKI, A.	81
GÓMEZ, J. C. C.	226	K	
GALANTUCCI, L.	108	KAISER, R.	95
GALINDO, D. M.	62	KAMIZAKI, L.	195
GAMBOA, C. G.	188	KANE, A. O.	227
GARCIA, M. R.	276	KASSAB, G.	63, 175, 204
GARCIA, R.	35	KELLER, M.	144
GARCIA, W.	282	KNOPKI, H.	69
GARRATT, R. C. 147, 163, 173, 226, 255, 298		KURACHI, C. ..	43, 45, 63, 142, 175, 204, 257, 291
GAWRILJUK, V.	177	L	
GETELINA, J.	215	LÍBERO, V. L.	48
GILER, A. G. D.	153	LANG, R. G.	151
GIMENES FILHO, P. G.	66	LEÃO, M.	167
GODOY, A. S. D.	177, 218, 224	LEAL JUNIOR, J. M.	262
GOENAGA, L.	257	LEAL, A. C. D. S.	165
GOETTEMS, E. I.	90	LEAL, T. C.	112
GOMES, N. D.	91	LEITE, A. E. T.	97
GONÇALVES, D.	216, 306	LEMES, M. F. S.	42
GONÇALVES, R.	56, 74, 92	LEONARDO, D.	255
GONÇALVES, R. R.	102	LIMA, V. R. D.	185
GONÇALVES, R. V.	189, 245, 268	LINS, P. M. P.	30, 39, 67, 152
GREGORIO, G. M.	285	LINS, R.	116
GUESSI, L. H. B.	232	LIVRAMENTO, L. R.	155
GUIDO, R. V. C.	116, 118, 140, 250	LONDON, C. Y. M.	110
GUIMARAES, F. E. G.	200	LOPES, G.	309
GUSSON, B.	31	LOPES, J. L. D. S.	112
GUTIERREZ, E. D. M.	202, 237, 253, 295	LOPES, M.	234
GUTIERREZ, R. R. F.	187	LUCHESI, A. C. F.	304
H		M	
HARTMANN, B.	141, 209, 223, 285, 296	MÁXIMO, C. E.	95
HEMMERLING, M.	264	MACHICAO, J.	58
HENN, E.	191	MACIEL, T. O.	90
HENRIQUE, F. R.	238	MADEIRA, L.	108
HERNANDEZ, L. E.	207		
HIGASI, P. M. R.	144		
HILARIO, A.	228		

MAGNANI, P. H. N.	231	MOURA, A. F. D.	217
MAGNO, G. F.	115	MOUSSA, M.	183
MAIA, L. P.	166, 290	MOYSÉS, R.	29
MALAVAZI, A. H. A.	206	MUNIZ, J. R. C.	214, 282
MALAVAZZI, H.	270	MUNIZ, S.	53, 109, 137, 174
MANZANI, D.	102		
MANZINE, L.	310	N	
MARCASSA, L. G.	91, 205	NAKAMURA, A.	224
MARCO, R. D.	50, 70, 80, 220, 280	NAPOLITANO, R.	41, 117, 228, 240
MAREGA, E.	42, 88, 102	NASCIMENTO, A. S.	161, 187, 194
MARQUES, M. J. D. A. M.	43	NASCIMENTO, G.	299
MARTÍNEZ-HUERTA, H.	34	NASCIMENTO, I. S. D.	30
MARTINELLI, L. P.	125	NAVARRO, M. V. D. A. S.	288
MARTINELLI, T.	148	NAVES, C. B.	284
MARTINS, E. E. B.	138	NEVES, G. A. D.	106
MARTINS, M. J.	305	NEVES, L.	82
MARTINS, R. J.	238	NOGUEIRA, V.	116
MARTINS, T. T.	174	NOSKE, G. D.	177, 218, 224
MARTINS, W.	134		
MATERON, E. M.	139, 299	O	
MATIAS, P.	128	ODA, Y. S.	145
MATTOS, V. S.	179, 307	OITICICA, P. R. A.	168
MAZO, P.	202, 237, 253	OLIANI, F.	239
MEDEIROS, A.	212	OLIVA, G.	116, 177, 218, 224
MEIRELES, V. D.	251	OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	139, 168, 197, 198, 217, 265, 299
MELO, N.	142	OLIVEIRA NETO, F. de	193
MENDES, L.	229	OLIVEIRA, C.	121
MENDES, T. C. D. R.	262, 274	OLIVEIRA, C. E. D.	311
MENDONÇA, D. C.	163	OLIVEIRA, E. A. B.	252
MENDONCA, C.	33, 76, 93, 98, 238	OLIVEIRA, G. A. D.	202, 237, 253
MENEGHELLO, R.	288	OLIVEIRA, L. N. D.	184, 221, 232
MENEZES, B. C.	33	OLIVEIRA, N. P. D.	79
MERIZIO, L.	59	OLIVEIRA, V. G. F.	218, 224
MIASSI NETTO, L.	70	OROZCO, A. D. G.	108
MIOTTI, M.	264	OTTO, M. P.	49
MIRANDA, P. B.	171, 241	OTUKA, A. J. G.	55, 64
MIRANDA, W. M.	124		
MISOGUTI, L.	29	P	
MONTES, R.	287	PAIVA, F. F.	53, 133, 157
MORAES, J. Q. R.	55	PALMA, N.	171
MORAZOTTI, N.	117	PASTORE, A. M.	120
MOREIRA, N. A.	95	PAULA, K.	36
MORENO, Y.	261	PAULI, I. G.	65
MORGUETTO, G. F.	297	PELLEGRINI, V. O. A.	144, 164, 227
MORIYAMA, L. T.	196	PELOSI, A.	93
MOTA, D.	280	PEREIRA, H. D.	147, 173, 255
MOTTA, O. D.	41	PEREIRA, V. A. M. C.	71

PICOLI, F. D.	48	SANTANA JUNIOR, A. B. de	235
PINTO, R. D.	61, 289	SANTILLAN, J. A. V.	226
POLIKARPOV, I.	57, 97, 136, 164, 227, 310	SANTO, M. C. E.	227
POPULIM, M. S.	83	SANTO, R.	140
PORTUGAL, R. V.	163	SANTO, R. D. E.	118
POUSSEP, Y.	111	SANTOS, A. L. D.	185
PRATAVIEIRA, S.	79, 84, 272, 276	SANTOS, A. M.	56
PUPIM, L.	308	SANTOS, B. N.	191
Q			
QUATRONI, F. D.	31, 39	SANTOS, F.	301
QUEIROZ, A. A. A. E. D.	100	SANTOS, J. P. C. D.	80
R			
RABELO, L.	74	SANTOS, K. F. D.	139
RAIA NETO, M.	75	SANTOS, L. M. D. S. M. D.	78
RAMOS, I.	52	SANTOS, M. C. D.	185
RAMPIM, A.	150	SANTOS, M. L. D.	271
REDIN, G. G. I.	216	SANTOS, S. C. D.	185
REIS, L. A.	44	SANTOS, S. N. C.	33
REIS, R. D.	50	SANTOS, T. T. D.	179
RENATA, F. H.	33	SANTOS-FILHO, N. A.	112
RESENDE, B. M. F. D.	254	SARRIA, J. J. H.	197
RIBOVSKI, L.	114, 152	SCABINI, L.	203
RIGHETTO, G. M.	112	SCHNEIDER, J. F.	297
RIOS, A. L. V.	54, 159	SCIUTI, L.	96, 98
RIVERA, V. A. G.	102	SEGATO, F.	144
RIVERO, D.	275	SENA, V.	46
RODRIGUES JUNIOR, M. T.	210	SEPULCHRO, A. G. V.	164
RODRIGUES, C. T.	219, 244	SILVA, A. C.	53
RODRIGUES, F. A.	148, 261	SILVA, C. C.	248
RODRIGUES, M. V.	107	SILVA, C. F.	302
RODRIGUES, N. E.	213	SILVA, E. C.	300
RODRIGUES, V. C.	198	SILVA, G. R. D.	185
ROMANO, R.	45	SILVA, G. V. D.	159, 236
ROMERO-ROCHÍN, V.	264	SILVA, J. L. F. D.	258, 279
ROQUE, C.	140	SILVA, L.	183
ROSA, R. G. T.	238	SILVA, L. D. A. D. J.	190
RUGGIERO, C.	128	SILVA, O. D. B.	102
RUIZ, G.	32	SILVA, P. F.	109, 174
S			
SALAZAR, J. R. M.	197	SILVA, R. M.	298
SALCEDO, D. L. P.	292	SILVEIRA, J. F. R. V.	258
SALCEDO, E. G. I.	202, 237, 253	SIPAHI, G. M.	51, 65, 103, 246, 279, 311
SALHANI, J. A. S.	122	SIQUEIRA, A.	246
SALOMON, B. L. R.	51	SIQUEIRA, J. D. P.	238
SAMPAIO, I.	31, 39	SOARES, J. M.	142, 143
		SOARES-PINTO, D. O.	32, 104, 115, 134, 148, 169, 213, 229, 230, 284
		SOBRAL, J. A.	156
		SOLCIA, G.	133
		SOUSA, F. A. D. D.	276

SOUSA, M. S.	241	V	
SOUZA, G.	45, 116, 118	VACILOTTO, M. M.	57
SOUZA, H. R. D.	313	VALADARES, N.	173
SOUZA, L. V. D.	153	VANZELLA, D.	172, 247
SOUZA, M.	210	VELASCO, J.	144
SOUZA, M. S.	86	VENTURA, P. C.	261
SOUZA, P.	305	VIANA, A.	49, 260
SOUZA, R. F. S. D.	170	VICENTE, M. L. F.	38
SOUZA, V. D.	34, 121, 151, 186, 235	VIDOTO, E. L. G.	305
STROZI, H.	85	VOLLET FILHO, J. D.	257, 276, 291
T		W	
TAKEUTI, N.	31	WANDERLEY, A. B.	279
TANNUS, A.	287, 305	WEST, D.	258
TAVARES, B.	111	WESTIN, R.	192
TEIXEIRA, J.	128	WRENGER, C.	187
TEIXEIRA, R. C.	231	Y	
TELES, H.	266	YAMAUTI, J.	31
TELLES, G. D.	78, 138	YOUSSEF, M.	123, 193
TEODOSIO, N.	281	Z	
THIEMANN, O. H.	89, 167	ZAGO, L. A.	200
TOMÉ, A. J. B.	63, 175	ZANGIROLAMI, A.	263
TOMISHIYO, G.	119	ZANINI, C.	140
TORRES, M. L.	205	ZANON, J.	278, 312
TOVAR, J. S. D.	63, 175, 204	ZAPATA, J. C. B.	217
TRAVIESO, G.	234, 281	ZENATTI, L.	236
TRINDADE, G.	60	ZHANG, S.	258
TUESTA, M. A. M.	277	ZUCOLOTTO, V.	30, 31, 39, 67, 114, 152, 242, 277, 300
U			
UNIGARRO, A. D. P.	243		
USON, I.	173		

PATROCÍNIO



APOIO



IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

