

I Semana do
Instituto de Física de São Carlos
Universidade de São Paulo

Caderno de Resumos



Física: uma ciéncia sem fronteiras.



17
A
21
2011
OUTUBRO



São Carlos-SP, 2011



IFSC

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

**I Semana do IFSC
SIFSC**

Caderno de Resumos

**São Carlos
2011**

Universidade de São Paulo

Reitor João Grandino Rodas

Vice-Reitor Helio Nogueira da Cruz

Instituto de Física de São Carlos

Diretor Antonio Carlos Hernandes

Vice-Diretor Vanderlei Salvador Bagnato

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Gracieli B. Pepe Cardoso

Luciana Ap. Brasil Martinez

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Tania Ortin de Almeida

Vilma Del Grossi Coutinho

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC

Semana do IFSC.(1. : 17 - 21 out. : 2011: São Carlos, SP.)

Cadernos de resumos/Organizado por Ivan R. e Silva e Daiana E. Martil. São Carlos: IFSC, 2011.

387p.

ISBN 978-85-61958-01-5

1. Física. I. Silva, Ivan R. e. II.Martil, Daiana E. III.Título.

CDD 530



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

I SEMANA DO IFSC

Coordenadores

Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandes

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

Prof. Dr. Tito José Bonagamba

Coordenador do Programa de Pós-Graduação e Presidente da Comissão de Pós-Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Pós-Graduação

Hilde Harb Buzzá

Ivan Rosa e Silva

Layla Pires

Mestrado na área de Física Aplicada Biomolecular

Daiana Evelin Martil

Marcos Michel de Souza

Wanessa Fernanda Altei

Doutorado na área de Física Aplicada Biomolecular

Graduação

Evandro Martinez Ribeiro

Jessica Dipold

Matheus do Carmo Teodoro

Rafael Bruno Barbosa Lima

Raul Prado Ribeiro

Renato Takao Matura de Lima Naomy Duarte Gomes

Bacharelado em Física

Daniel Cosmo Pizetta

Milena Menezes Carvalho

Bacharelado em Física Computacional

Amanda Cristina Zangirolami

Caio Vaz Rimoli

Crislaine Janine Campos

Lucas Henrique Trevelin

Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

I SEMANA DO IFSC

Comissões de Avaliação

Presidente da Comissão de Avaliação - Prof. Dr. Otavio Henrique Thiemann

Comissão de Avaliação do Workshop de Graduação

Dr. Alessandro Cosci
Dra. Ana Isabel de Camargo
Dra. Ana Isabela Lopes Sales
Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo
Dr. Assuero Faria Garcia
Dr. Carlos José Todero Peixoto
Dr. César Moisés Camilo
Prof. Dra. Claudia Elisabeth Munte
Prof. Dr. Eduardo Horjales
Prof. Dr. Euclides Marega Júnior
Dr. Fábio Henrique Dynzy
Dr. Helton José Wiggers
Dra. Izaltina Silva Jardim Cavalli
Prof. Dr. José Fabian Schneider
Dra. Lara Fernandes dos Santos Lavelli
Prof. Dr. Leonardo Paulo Maia
Prof. Dr. Lino Misoguti
Prof. Dr. Marcelo Alves Barros
Dr. Marcelo Gonçalves Vivas
Prof. Dr. Otávio Henrique Thiemann
Dra. Renata Krogh Andricopulo
Prof. Dr. Ricardo de Marco
Dr. Sérgio Paulo Amaral Osório
Dra. Stella Torres Müller
Dra. Teresa Cristina Leandro de Jesus
Prof. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Comissão de Avaliação do Workshop de Pós-Graduação

Prof. Dr. Adriano Defini Andricopulo
Dra. Alessandra Nara de Souza Rastelli
Dr. Alessandro Cosci
Dra. Ana Carolina Mafud Landgraff
Dra. Ana Isabel de Camargo
Dra. Ana Isabela Lopes Sales
Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo
Dr. Andre Gustavo Scagliusi Landulfo
Prof. Dr. Antonio José da Costa Filho
Dr. Assuero Faria Garcia
Prof. Dr. Attilio Cucchieri
Dra. Camila Alves de Rezende
Dr. Carlos Jose Todero Peixoto
Dr. Carlos Renato Menegatti
Dr. Cesar Moisés Camilo
Prof. Dra. Claudia Elisabeth Munte
Prof. Dra. Cristina Kurachi
Dr. Diogo de Oliveira Soares Pinto
Dr. Edgar Aparecido Sanches
Prof. Dr. Eduardo Horjales Reboredo
Prof. Dr. Esmirindo de Sousa Bernardes
Prof. Dr. Euclides Marega Júnior
Dr. Fábio Henrique Dyszy
Prof. Dr. Gonzalo Travieso
Dr. Gustavo Deczka Telles
Dr. Gustavo Nicolodelli
Dr. Helton Jose Wiggers
Dra. Izaltina Silva Jardim Cavalli
Prof. Dr. Javier Alcides Ellena
Dra. Joci Neuby Alves Macedo
Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto
Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes
Prof. Dr. José Fabian Schneider
Dr. José Luiz de Souza Lopes
Dr. José Pedro Andreeta
Prof. Dr. José Pedro Donoso Gonzalez
Prof. Dr. Juarez Lopes Ferreira da Silva
Dra. Juliana Cheleski
Dra. Kilvia Mayre Farias Magalhães

Dra. Lara Fernandes dos Santos Lavelli
Prof. Dr. Leandro Martínez
Pro. Dr. Leonardo Paulo Maia
Dra. Lilian Tan Moriyama
Prof. Dr. Lino Misoguti
Dra. Lívia Nordi Dovigo
Dr. Luciano Gonsalves Costa
Dr. Luis Fernando Reyes
Prof. Dr. Luis Gustavo Marcassa
Prof. Dr. Luiz Agostinho Ferreira
Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira
Dr. Marcello Rubens Barsi Andreeta
Dr. Marcelo Barbosa de Andrade
Dr. Marcelo Gonçalves Vivas
Dra. Mariana Torres Carvalho
Dr. Mario Alexandre Gazziro
Dr. Napoleão Fonseca Valadares
Dra. Natalia Mayumi Inada
Prof. Dra. Nelma Regina Segnini Bossolan
Prof. Dr. Odemir Martinez Bruno
Prof. Dr. Paulo Barbeitas Miranda
Dr. Pawel Klimas
Prof. Dr. Rafael Victório Carvalho Guido
Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano
Dra. Renata Krogh Andricopulo
Prof. Dr. Reynaldo Daniel Pinto
Prof. Dr. Ricardo de Marco
Prof. Dr. Richard Charles Garratt
Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody
Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira
Prof. Dr. Sérgio Carlos Zilio
Dr. Sergio Paulo Amaral Osorio
Dr. Sérgio Ricardo Muniz
Dra. Stella Torres Müller
Dra. Teresa Cristina Leandro de Jesus
Prof. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes
Prof. Dr. Tito José Bonagamba
Prof. Dr. Valmor Roberto Mastelaro

Comissão avaliadora para o prêmio "Yvonne Primerano Mascarenhas"

Dr. Alessandro Cosci
Dra. Ana Carolina Mafud Landgraff
Dra. Ana Isabel de Camargo
Dra. Ana Isabela Lopes Sales
Prof. Dra. Ana Paula Ulian de Araújo
Dr. André Gustavo Scagliusi Landulfo
Dr. Carlos Jose Todero Peixoto
Dr. Carlos Renato Menegatti
Prof. Dra. Claudia Elisabeth Munte
Prof. Dra. Cristina Kurachi
Dr. Edgar Aparecido Sanches
Prof. Dr. Eduardo Horjales Reboredo

Prof. Dr. Euclides Marega Junior
Dr. Fábio Henrique Dyszy
Dr. Frederico Dias Nunes
Gustavo Deczka Telles
Dr. Helton José Wiggers
Prof. Dr. José Fabian Schneider
Dr. Juarez Lopes Ferreira da Silva
Dra. Juliana Cheleski
Dra. Kilvia Mayre Farias Magalhães
Dra. Lara Fernandes dos Santos Lavelli
Dra. Larissa Consani Textor
Prof. Dr. Leonardo Paulo Maia

Prof. Dr. Lino Misoguti
Dr. Luiz Fernando Reyes
Dr. Marcello Rubens Barsi Andreeta
Prof. Dr. Marcelo Alves Barros
Dr. Marcelo Gonçalves Vivas
Dra. Mariana Torres Carvalho
Dra. Natália Mayumi Inada
Prof. Dr. Paulo Barbeitas Miranda
Prof. Dr. Rafael Victório Carvalho Guido
Prof. Dr. Ricardo de Marco
Prof. Dr. Sérgio Carlos Zilio
Dr. Sérgio Paulo Amaral Osório

Dr. Sérgio Ricardo Muniz
Dra. Stella Torres Muller
Dra. Teresa Cristina Leandro de Jesus
Prof. Dr. Valtencir Zucolotto



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

AGRADECIMENTOS

DIRETORIA DO IFSC-USP:

Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandes - diretor
Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato – vice-diretor
Maria Helena Braga de Carvalho - secretária

SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO:

Silvio César Athayde
Ricardo Vital do Prado

SERVIÇO DE GRADUAÇÃO:

Isabel Aparecida Possatto de Oliveira
Edvane Mariza Vicentini Cavallaro
Ana Glauzia Fiscarelli

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO PROF. BERNHARD GROSS:

Maria Helena Di Francisco
Natalina O. Ribeiro Ziemath
Célia Maria D. Martins
Luciana A. B. Martinez
Maria Cristina Cavarette Dziabas
Maria Neusa A. Azevedo
Sabrina di Salvo Mastrantonio
Ana Mara M. C. Prado
Gracielli Batista Pepe Cardoso
Vilma Del Grossi Coutinho
Tania Ortin de Almeida

SEÇÃO DE GRÁFICA:

Denise Aparecida Aiello Portela
Italo Carlos Celestini
Aurotides Celestino Vieira

Rafaela Barbosa Pinto – Web Designer

APOIO:





I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Programa

Durante a I Semana do IFSC, além dos painéis expostos pelos alunos da graduação e pós-graduação do IFSC, foram realizadas as seguintes atividades:

Programação:

SEGUNDA – FEIRA (17/10/2011)	
Horário	Evento
11:00 – 12:00	Abertura
14:00 – 15:00	<u>PALESTRA 1</u> - A Física da vida Herch Moysés Nussenzveig (UFRJ)
15:15 – 16:15	<u>PALESTRA 2</u> - Desenho e simulação de sistemas sintéticos baseados em proteínas Liza Felicori (ICB-UFMG)
17:00 – 18:00	Workshop de Iniciação Científica
19:30 – 20:45	<u>PALESTRA 3</u> - Política Científica
TERÇA – FEIRA (18/10/2011)	
Horário	Evento
8:00 – 9:00	<u>PALESTRA 4</u> - Sistemas complexos Mauro Copelli Lopes da Silva (UFPE)
9:15 – 10:15	<u>PALESTRA 5</u> – Física de Partículas Luiz Vitor de Souza Filho (IFSC-USP)
11:00 – 12:00	<u>PALESTRA 6</u> - Utilização de simulações com Dinâmica Molecular e Método Monte Carlo para estudar efeitos do meio em propriedades de (bio)moléculas Kaline Coutinho (IF-USP)
14:00 – 15:00	<u>PALESTRA 7</u> - Biofísica do sono Gunther J. Lewczuk Gerhardt (UFRGS)
15:15 – 16:15	<u>PALESTRA 8</u> - A aerodinâmica da bola de futebol Carlos Eduardo Aguiar (UFRJ)
17:00 – 18:00	Workshop da Pós-Graduação
19:30 – 20:45	Grupo de Teatro Atuando em Psi - IFSC
QUARTA – FEIRA (18/10/2011)	
Horário	Evento
8:00 – 12:00	Minicursos
13:00 – 13:45	<u>PALESTRA 9</u> - EndNote web Deborah Dias (Thomson Reuters)
14:00 – 16:15	Mesa-Redonda com ex-alunos do IFSC
18:00 – 19:00	Workshop da Pós-Graduação
19:30 – 20:45	Orquestra USP Filarmônica - Ribeirão Preto Maestro Rubens Russomano Ricciardi



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

QUINTA – FEIRA (20/10/2011)

Horário	Evento
8:00 – 9:00	<u>PALESTRA 10</u> - Redes Neurais Nestor Felipe Caticha Alfonso (USP - SP)
9:15 – 10:15	<u>PALESTRA 11</u> - Física e Ficção Científica Elso Drigo Filho (UNESP)
11:00 – 12:00	<u>PALESTRA 12</u> - O Papel do Físico na Petrobrás Luiz Fernando Araujo Oliveira (PETROBRÁS)
14:00 – 15:00	<u>PALESTRA 13</u> - TRABALHOS ACADÊMICOS: Estrutura e Normalização SBI/IFSC
15:15 – 16:15	Mesa-redonda sobre concursos públicos
17:00 – 18:00	Workshop da Pós-Graduação

SEXTA – FEIRA (21/10/2011)

Horário	Evento
8:00 – 12:00	Mini-Workshop de Difusão Científica
14:00 – 15:00	<u>PALESTRA 14</u> - Ética nas ciências: penso, logo insisto! Osvaldo Augusto Sant'Anna (Instituto Butantan)
15:15 – 16:15	<u>PALESTRA 15</u> - Física Forense Andréa Porto Carreiro Campos (INMETRO)
17:00 – 17:45	Encerramento



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Mini-cursos:

Graduação

M5 - Reatores Nucleares de Potência
Prof. Dr. Luis Antônio Albiac Terremoto (IPEN)

M6 - Genética Forense
Profa. Dra. Regina Maria Baretto Cicarelli

M7 - Computação Reconfigurável e suas Aplicações
Prof. Dr. Eduardo Marques e Prof. Dr. Vanderlei Bonato (ICMC)

Pós-Graduação

M1 - Introdução à Informação Quântica
Prof. Dr. Ernesto Galvão (UFF)

M2 - Microscopia em Sistemas Biológicos
Profa. Dra. Rossana Melo (UFJF)

M3 - Programação em CUDA
Prof. Dr. Raphael Y. de Camargo (UFABC)

M4 – Tópicos Modernos em Nanociência
Prof. Dr. Frank Nelson Crespilho (UFABC)

Mesas redondas:

MR1 - Mesa-Redonda com ex-alunos do IFSC

Participante	Origem
Diego Lencione	OPTO Eletrônica S/A
Ivan Rosa e Silva	Mestrado – IFSC-USP
Prof. Dr. Carlos Antônio Ruggiero	IFSC-USP
Convidados da AlumnIFSC	

MR2 - Mesa-redonda sobre concursos públicos

Participante	Origem
Prof. Dr. Luis Nunes de Oliveira	CLR -USP / IFSC-USP
Prof. Dr. Leandro Martinez	IFSC-USP
Profa. Dra. Cristina Kurachi	IFSC-USP
Prof. Dr Otavio Henrique Thiemann	Coordenador do Curso de Bacharelado em C. F. Biomoleculares

Exposições:

Produção científica do IFSC – SBI/IFSC	Todos os dias no salão de eventos - mesanino
Exposição de artes : O IFSC sob seu próprio olhar	Todos os dias no salão de eventos - mesanino
Exposição de artes: O IFSC sob o olhar da Arte	Prédios do IFSC e salão de eventos



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Apresentação da I SIFSC

O evento “*Semana Integrada de Graduação e Pós-Graduação do Instituto de Física de São Carlos*” (SIFSC) surgiu a partir do Workshop da Pós-Graduação, associado aos cursos de mestrado e doutorado em Física do IFSC, e do Workshop da Graduação (ou SEMAFIS em 2010), associado aos cursos de bacharelado em Física, Ciências Físicas Biomoleculares e Física Computacional. Os dois workshops eram organizados e realizados separadamente e com temáticas próprias. Com a SIFSC congregamos os dois workshops, expandimos a sua atuação e permitimos que graduandos e pós-graduandos, em conjunto e em consenso, definissem a temática e os convidados para o evento. Um exercício importante e enriquecedor especialmente para os membros da Comissão Organizadora.

Para o I SIFSC o tema escolhido foi *Física: Uma Ciência Sem Fronteiras*. A programação está abrangente, de alto nível científico e os mais de 700 inscritos terão a oportunidade de assistir palestras como: A Física da Vida, Física Forense, A Aerodinâmica da Bola de Futebol, Computação Musical, entre outras de interesse de toda a comunidade. Entre os minicursos programados um será dedicado a Difusão Científica, em que teremos a presença de jornalistas de importantes veículos de comunicação do país.

Ainda vale destacar a apresentação dos trabalhos de Iniciação Científica e dos pós-graduandos do IFSC. Será uma oportunidade única para a comunidade conhecer o que tem sido realizado de pesquisa em nossa instituição. Os melhores trabalhos serão premiados com estágio no exterior por um período de até 3 meses.

Outro destaque da Semana Integrada será a realização da *Primeira Reunião dos Ex-Alunos (antigos alunos) do IFSC*, organizado pela AlumnIFSC, que acontecerá no dia 19 de outubro. Na programação uma mesa redonda com os ex-alunos, uma atividade cultural e, no período da noite, um jantar de confraternização.

Antes de finalizar essa apresentação do I SIFSC não posso deixar de registrar que começamos bem e com um tamanho bastante razoável – mais de 700 inscritos. Com isso, um dos objetivos da Semana foi atingido com sucesso – ter a comunidade do IFSC em conjunto em um único evento. Parabéns a Comissão Organizadora pelo excelente trabalho.

Quero aproveitar para agradecer a Comissão Organizadora e, também, o apoio dos servidores administrativos pela atenção com nossos graduandos e pós-graduandos. Muito obrigado.

Excelente SIFSC a todos!

Prof. Dr. Antonio Carlos Hernandes
Diretor IFSC - USP



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Apresentação do Workshop de Iniciação Científica

O **Workshop de Iniciação Científica** do IFSC/USP será o primeiro evento desta natureza realizado em conjunto com o **Workshop de Pós-Graduação**, no instituto com o objetivo de divulgar os trabalhos de pesquisa realizados por alunos de graduação atuando nas diversas áreas de pesquisa apoiadas pelo IFSC. Estas não se restringem as áreas de física, mas envolvem a química, bioquímica, computação ou matemática. É, portanto um evento de grande importância para nosso Instituto, pois permite além da divulgação dos trabalhos científicos de grande relevância e qualidade realizados pelos alunos dos diversos cursos de bacharelado e licenciatura, estimula a interação entre os estudantes de graduação entre si e com os estudantes de pós-graduação, e os docentes do IFSC/USP. Deste modo, a comunidade do IFSC e dos institutos do campus de São Carlos vem a conhecer melhor a pesquisa básica e aplicada de caráter multi e interdisciplinar desenvolvida em nossos laboratórios pela dedicação de seus alunos de graduação.

O evento contará com a apresentação de 30 trabalhos desenvolvidos por alunos de graduação nas diversas áreas de pesquisa desenvolvidas no IFSC, na forma de pôsteres que serão avaliados por membros da comunidade científica do IFSC. Além da apresentação dos trabalhos o evento contará com diversas palestras e debates sobre a temática principal da “**Física: uma ciência sem fronteiras**”.

A handwritten signature in cursive script, appearing to read "Thiemann..".

Prof. Dr. Otávio H. Thiemann
Coordenador do Curso de Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Apresentação do *Workshop* do Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP

O *Workshop* do Programa de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP é um evento de grande importância para nosso Instituto, sendo organizado pelos próprios alunos da instituição, com o apoio e supervisão da Comissão de Pós-Graduação. Além de permitir a divulgação dos trabalhos científicos de mestrado e doutorado que estão sendo desenvolvidos pelos nossos alunos, ele estimula a interação entre os estudantes de graduação e pós-graduação, os pós-doutorandos, os técnicos de nível superior, pesquisadores visitantes e os docentes do IFSC/USP. Deste modo, todos os pesquisadores da Unidade, que atuam nas diferentes áreas de concentração (Física Básica e Aplicada, Física Computacional e Biomolecular), podem conhecer melhor, tanto o nível da pesquisa básica e aplicada desenvolvida no Instituto, quanto o caráter multi e interdisciplinar ímpar de nossa instituição, que contamina, de forma salutar, todas as atividades de pesquisa da Unidade.

Devido à sua importância, este evento passou a servir oficialmente como uma das etapas obrigatórias de avaliação dos pós-graduandos, que é realizada através dos pôsteres apresentados, fazendo parte do calendário de atividades do nosso Programa, sendo sempre realizado no final do segundo semestre de cada ano. Neste ano, o *Workshop* foi inserido nas atividades da “Semana Integrada de Graduação e Pós-Graduação” do IFSC.

Além da apresentação de cerca de 200 trabalhos de pós-graduação apresentados pelos alunos na forma de pôsteres, que serão avaliados por docentes, pesquisadores visitantes, técnicos de nível superior pós-graduados e pós-doutorandos, teremos também uma série de palestras e mesas redondas, todas conectadas por um tema principal: **“Física: uma ciência sem fronteiras”**.

Serão vários dias de intensas atividades científicas e culturais que promoverão uma grande integração entre todos que participam direta ou indiretamente do nosso Programa de Pós-Graduação.

A Comissão de Pós-Graduação em Física do IFSC/USP agradece a participação de todos.

Prof. Dr. Tito Bonagamba
Presidente da Comissão de Pós-Graduação



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Sumário

WORKSHOP DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

IC-1A - Modelo de potencial para o bottomônio SERRONE, Willian Matioli; MENDES, Tereza Cristina da Rocha	36
IC-1B - Potential model for heavy quarks SERRONE, Willian Matioli; MENDES, Tereza Cristina da Rocha ¹	37
IC-2A - Introdução à física em espaços curvos e à teoria quântica de campos PIMENTA, Leandro Silva; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla.....	38
IC-2B - Introduction to physics in curved space-times and quantum field theory PIMENTA, Leandro Silva; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla.....	39
IC-3A - Análise da percolação em redes Erdös-Rényi WANDERLEY, Adilson Barros.....	40
IC-4A - Homogeneidade morfológica neural: buscando outliers em categorias de células neurais ZAWADZID, Krissia	41
IC-5A - Relação temperatura-composição química de discos de acreção proto-estelares em estrelas T-Tauri OLIVEIRA, Luma Melo de; PEREIRA, Vera Jatenco	42
IC-6A - Estudo de composição de raios cósmicos de altíssimas energias baseado na taxa de elongação medida pelo observatório Pierre Auger PRADO, Raul Ribeiro; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de.....	43
IC-7A - Propriedades em raios X de estrelas Wolf-Rayet RIBEIRO, E. M.; OLIVEIRA FILHO, R. L.	44
IC-8A - Desenvolvimento da óptica de telescópios para experimentos de astrofísica de partículas DIPOLD, Jessica; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de.....	45
IC-9A - Franjas de Ramsey em um relógio atômico compacto SMAIRA, A. F.; MÜLLER, S. T.; BAGNATO, S. V.; MAGALHÃES, D. V.	46
IC-9B - Ramsey fringes in a compact atomic clock SMAIRA, A. F.; MÜLLER, S. T.; BAGNATO, S. V.; MAGALHÃES, D. V.	47
IC-10A - Dispositivo orgânico com multiplas camadas: estudo da dinâmica dos excitons e da transferência de cargas DO VALE, Mike M.; CATANDI, Patrícia Bongiovanni; FARIA, Roberto Mendonça; Francisco Eduardo Gontijo Guimarães.....	48
IC-11A - Caracterização magnética e elétrica de ligas antiferromagnéticas de Cr-Mn DALLA-COSTA, Leonardo J.	49

IC-12A – Estrutura atômica de nanoalloys de Pt-Ni: um estudo pelo método de Basin Hopping Monte Carlo Atomic	
LOPES, Victor F. P., RONDINA, Gustavo G., PIOTROWSKI, Mauricio J., DA SILVA, Juarez L. F.....	50
IC-12B – Atomic structure of Pt-Ni nanoalloys: A Basin-Hopping Monte Carlo study	
LOPES, Victor F. P., RONDINA, Gustavo G., PIOTROWSKI, Mauricio J., DA SILVA, Juarez L. F.....	51
IC-13A – O uso da relação de Scherrer na determinação dos tamanhos dos cristalitos em amostras de carbono grafite micronizadas	
SILVA, Geisiane Rosa da; SANCHES, Edgar Aparecido; MASCARENHAS, Yvonne Primerano.....	52
IC-14A - Resposta de peixes elétricos de campo fraco à diferentes estímulos	
GUARIENTO, Rafael Tuma	53
IC-15A - Buscando medidas de dinâmica de estados excitados ultrarrápida: instrumentação de uma espectroscopia pump-probe	
RIMOLI, Caio Vaz; FALEIROS, Marcelo Meira; MIRANDA, Paulo Barbeitas	54
IC-15B - Searching for ultrafast excited state dynamics measurements: a pump-probe spectroscopy instrumentation	
RIMOLI, Caio Vaz; FALEIROS, Marcelo Meira; MIRANDA, Paulo Barbeitas	55
IC-16A - Biosensores para nanodiagnóstico: detecção por uréase	
FAIS, Letícia ¹ ; ZUCOLOTTO, V. ¹	56
IC-16B - Biosensors for nanodyagnostics: urease detection	
FAIS, Letícia; ZUCOLOTTO, V.....	57
IC-17A - Sensores biomiméticos nanoestruturados para detecção de compostos fenólicos	
BRAZACA, L. C.; FERNANDES, E. G. R.; RODRÍGUEZ-MÉNDEZ, M. L.; SAJA, J. A.; ZUCOLOTTO, V.	58
IC-18A - Medidas de distâncias inter-resíduos utilizando ressonância paramagnética eletrônica em regime pulsado	
MENDES, Luis Felipe Santos; LIMA, José Fernando; COSTA FILHO, Antônio José da.....	59
IC-19A - Estudos em RMN de alta pressão da proteína Tioredoxina de <i>Plasmodium falciparum</i>	
AZEVEDO, Érika Chang de; MUNTE, Claudia Elisabeth; KALBITZER, Hans Robert	60
IC-20A - Influência da adição de aminoácidos sobre a expressão da proteína recombinante PspA por <i>E. coli</i>	
CAMPANI JUNIOR, Gilson; SARGO, Cíntia Regina; GONÇALVES, Viviane Maimoni; ZANGIROLAMI, Teresa Cristina	61
IC-21A - Clonagem do gene da L-arabinofuranosidase de <i>Bifidobacterium bifidum</i> S17 pelo sistema LIC	
PINTO, Pedro Henrique Tomaz Torres; CAMILO, César Moisés; GODOY, Andre Schutzer de; POLIKARPOV, Igor	62
IC-22A - Mudanças estruturais em fitocistatinas híbridas analisadas por ressonância magnética nuclear de alta resolução	
CAVINI, Ítalo Augusto; GARRATT, Richard Charles; SILVA, Flávio Henrique; KALBITZER, Hans Robert; MUNTE, Claudia Elisabeth.....	63
IC-23A - Análises preliminares do fator de transcrição PerR (peroxide regulator) de <i>Enterococcus faecalis</i> JH2-2 para caracterização estrutural	
LIMA, Mariana Zuliani Theodoro de; GIARD, Jean-Christophe; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha	65

IC-24A -Estudo do domínio de ligação à celulose da enzima celobiohidrolase I	
MELLO, Bruno Luan; POLIKARPOV, Igor	66
IC-25A - Produção heteróloga das fosfodiesterases c-di-GMP-específicas da família HD-GYP de <i>Pseudomonas aeruginosa</i> e <i>Xanthomonas axonopodis</i>	
TORRES, Naiara Utimura; CHELESKI, Juliana; NAVARRO, Marcos V. A. S.....	67
IC-26A - Clonagem, expressão e purificação de Diguanilato Ciclases bacterianas para estudos estruturais e desenvolvimento de inibidores	
SILVA, Everton Edesio Dinis; WIGGERS, Helton José; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles	69
IC-27A - Estudos estruturais e de flexibilidade conformacional da proteína glucosamina-6-fosfato desaminase de <i>Escherichia coli</i>	
TEIXEIRA, Francesco Brugnera; CAMARA, Amanda Souza; REBOREDO, Eduardo Horjales.....	70
IC-28A - Expressão heteróloga e purificação de proteínas de <i>Trypanosoma brucei</i> envolvidas no processo de splicing	
MAKKI, Raphaela; THIEMANN, O. H.....	71
IC-28B - Heterologous expression and purification of Trypanosoma brucei protein involved in splicing process	
MAKKI, Raphaela; THIEMANN, O. H.....	72
IC-29A - Estudos estruturais e cinéticos das enzimas Timidilato Sintase (SmTS) e Citidina Desaminase (SmCytADA) de <i>Schistosoma mansoni</i>	
SERRÃO, V.H.B.; SOUZA, M. C.; PEREIRA, H. M.; THIEMANN, O.H.; GARRATT, R. C.	73
IC-30A – Padronização da expressão e purificação da Ers (Enterococcal Regulator of Survival)	
GUTIERREZ, Raissa Ferreira; GIARD, Jean-Christophe; CAMARGO, Ilana L. B. C.	74
IC-31A – Estudo da RNA polimerase do Leishmania virus – um vírus que controla a severidade da leishmaniose	
LIMA, A. L.; SOUZA, M. M.; THIEMANN, O. H.	75
IC-32A – Expressão, purificação e caracterização estrutural da Selenofosfato Sintetase de <i>Naegleria gruberi</i>	
MARTINS, Juliana Quintanilha; SILVA, Ivan Rosa e; SILVA, Marco Túlio Alves da; THIEMANN, Otávio Henrique	76
IC-32B – Expression, purification and structural characterization of Selenophosphate synthetase of <i>Naegleria gruberi</i>	
MARTINS, Juliana Quintanilha; SILVA, Ivan Rosa e; SILVA, Marco Túlio Alves da; THIEMANN, Otávio Henrique	78
IC-33A – Inserção do elemento SECIS em selenoproteínas de <i>Trypanosoma brucei</i>	
BELLINI, Natália Karla; THIEMANN, Otávio Henrique; EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti.....	80
IC-34A - Expressão, purificação e cristalização dos receptores ativados da proliferação de peroxissomos	
ZENATTI, Letícia; SANTOS, Jadmilson Celestino; POLIKARPOV, Igor.....	81
IC-35A - Estudo do fármaco antineoplásico tiotepa	
PEPINO, Rebeka de Oliveira	82

IC-36A - Estudos QSAR 3D - CoMFA de uma série de derivados imidazol-dioxolano com potente atividade anti-malária	
MULINARI, Evandro José; ANDRICOPULO, A.....	83
IC-37A - Diferença do efeito vascular em terapia fotodinâmica usando diferentes fotossensibilizadores	
SILVA, L. V.; BUZZA, H. H.; BAGNATO, V. S.; KURACHI, C.....	84
WORKSHOP DE PÓS-GRADUAÇÃO	
PG-1A - Uso de imagens de fluorescência para monitoramento da evolução do cancro cítrico	
WETTERICH, Caio Bruno; MARCASSA, Luis Gustavo.....	86
PG-2A - Explorando os diagramas de fase de não-equilíbrio de um novo modelo invariante conforme	
OLIVEIRA, Caio Martins Ramos de; ALCARAZ, Francisco Castilho	87
PG-3A - Avalanches no modelo de Kinouchi-Copelli	
VALENCIA, Camilo Akimushkin; MAIA, Leonardo Paulo; MOSQUEIRO, Thiago Schiavo	88
PG-3B - Avalanches in the Kinouchi-Copelli model	
VALENCIA, Camilo Akimushkin; MAIA, Leonardo Paulo; MOSQUEIRO, Thiago Schiavo	89
PG-4A - Litografia quântica	
MAXIMO, Carlos Eduardo; MOUSSA, Miled Hassan Youssef.....	90
PG-5A - Aspectos termodinâmicos da gravitação semiclássica	
LIMA, Cesar Augustus Uliana; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla	91
PG-5B - Thermodynamical aspects of semiclassical gravitation	
LIMA, Cesar Augustus Uliana; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla	92
PG-6A - Desenvolvimento de um novo sistema de aquisição para experimentos em condensados de Bose-Einstein	
CASTELO BRANCO, Cora; MUNIZ, Sérgio Ricardo; BAGNATO, Vanderlei Salvador.....	93
PG-7A - Isolantes topológicos: conceitos básicos	
CANDIDO, Denis R.; PENTEADO, Poliana H.; EGUES, J. Carlos	94
PG-8A - Estrutura eletrônica de sistemas hexagonais via o método k.p.	
PIRES, Diego Paiva; BERNARDES, Esmerindo de Sousa.....	95
PG-9A - Transporte dependente de spin através de um potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica	
PENHA, F. C.; ROETHLISBERGER, Beat; LOSS, Daniel; EGUES, J. Carlos.....	97
PG-10A - Caracterização de uma armadilha magneto óptica de sódio	
VIVANCO, Franklin Adán Julca; PAIVA, Rafael Rothganger de; PEÑAFIEL, Edwin Eduardo Pedrozo; MAGALHÃES, Kilia Mayre Farias; BAGNATO, Vanderlei Salvador	99
PG-10B - Characterization of a magneto optical trap of sodium	
VIVANCO, Franklin Adán Julca; PAIVA, Rafael Rothganger de; PEÑAFIEL, Edwin Eduardo Pedrozo; MAGALHÃES, Kilia Mayre Farias; BAGNATO, Vanderlei Salvador	100
PG-11A - Ferromagnetismo itinerante em sistemas unidimensionais	
SILVEIRA, Hudson Pimenta; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves	101

PG-11B - Itinerant ferromagnetism in one-dimensional systems	
SILVEIRA, Hudson Pimenta; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves	102
PG-12A - Desenvolvimento de metodologias de otimização de pulsos para estudos de informação quântica via RMN	
SILVA, Isabela Almeida; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de; PINTO, Diogo O. Soares	103
PG-13A - Imobilização da enzima glicose oxidase em filmes nanoestruturados para aplicação em biossensores: caracterização óptica, estrutural e eletroquímica	
SANTOS, Jaciara Cássia de Carvalho; ZUCOLLOTTO, Valtencir.....	105
PG-14A - Teoria quântica de correção de erros durante portas lógicas e medidas de síndrome de tempo finito	
CASTRO, Leonardo Andreta de; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus	106
PG-14B - Quantum error-correction theory during logical gates and finite-time syndrome measurements	
CASTRO, Leonardo Andreta de; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus	107
PG-15A - Estudo das ressonâncias moleculares envolvendo estados nS em átomos de Rydberg aprisionados numa armadilha de dipolo de CO₂	
GONÇALVES, L.F.; CABRAL, J. S.; KONDO, J. D.; MARCASSA, L.G.	108
PG-16A - Condensado de Bose-Einstein de estrôncio em uma rede óptica	
MIGUEZ, Maria Luiza; COURTEILLE, Philippe Wilhelm	110
PG-17A - Simulações computacionais da transmissão óptica em fendas de filmes constituídos por multicamadas metálicas via geração de SPP	
SILVA, Otávio de Brito; FERRI, Fábio A.; RIVERA, Victor A. G.; OSORIO, Sérgio A. P.; BORGES, Ben Hur V.; MAREGA JUNIOR, Euclides.....	111
PG-18A - Superradiância em amostras de átomos interagentes	
MORIYA, Paulo Hisao; MOUSSA, Miled Hassan Youssef.....	113
PG-19A - Sistema para estudo de excitações aleatórias em superfluidos atômicos	
TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo; TELLES, Gustavo Deczka; BAGNATO, Vanderlei Salvador; MAGALHAES, Kilvia Mayre Farias	114
PG-19B - System to study random excitations in atomic superfluids	
TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo; TELLES, Gustavo Deczka; BAGNATO, Vanderlei Salvador; MAGALHAES, Kilvia Mayre Farias	115
PG-20A - Sobre a termodinâmica do efeito de eco de spin	
SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico; PINTO, Diogo de Oliveira Soares; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de; BONAGAMBA, Tito José Bonagamba	116
PG-21A - Controle coerente das bandas de emissão do ZnO utilizando algoritmo genético	
MARTINS, Renato Juliano; MENDONÇA, Cleber Renato	117
PG-22A - Efeitos de hibridização correlacionada no modelo de Anderson de uma impureza	
VEIGA, Rodrigo Soares; LÍBERO, Valter Luiz	118
PG-23A - Fabricação de microestruturas dopadas com nanowires de ZnO e microestruturas birrefringentes por fotopolimerização por absorção de dois fóton	
RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca; GOMES, Vinicius Tribuzi, R. P.; MENDONÇA, Cleber Renato	120

PG-24A - Tratamento exato da interação sistema-reservatório e não-Markovianidade no regime de acoplamento forte	
BATALHÃO, Tiago Barbin; MOUSSA, Miled Hassan Youssef.....	121
PG-24B - Exact treatment of the system-reservoir interaction and non-Markovianity in the strong coupling regime	
BATALHÃO, Tiago Barbin; MOUSSA, Miled Hassan Youssef.....	122
PG-25A - Engenharia de reservatórios em redes de cavidades preenchidas por amostras atômicas	
MERCADO, Wilson Enrique Rosado; MOUSSA, Miled Hassan Youssef.....	123
PG-26A - Geração de segundo harmônico sintonizável por modulação de fase de pulsos ultracurtos	
OLIVEIRA, Anderson Roberto de; SIQUEIRA, Jonathas Paula; ZILIO, Sérgio Carlos	124
PG-27A - Gravação e caracterização de redes de Bragg em fibras ópticas	
ORLANDI, André Orlandi de; MISOGUTI, Lino; ZILIO, Sérgio Carlos	125
PG-28A - Montagem experimental para criar redes ópticas de estrôncio ultrafrio	
SALAS, Andres Rodriguez; VOGEL, Dominik; BENDER, Helmar	126
PG-29A - Sistemas ópticos para retinografia digital de alta resolução	
LENCIONE, Diego; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de; Mario Antonio Stefani	128
PG-30A - Processamento de sinais da pressão intracraniana: um novo cenário	
QUEIROZ, Diogo Rodrigues; VILELA, Gustavo Henrique Frigieri; CARDIM, Danilo Augusto; MASCARENHAS,Sergio; TANNUS, Alberto	129
PG-31A - Estudos de cerâmicas porosas via RMN	
MONTRAZI, E. T.; D'EURIDYCE, M. N.; SOUZA, A. A.; OLIVEIRA-SILVA, R.; AMORIN, A. D. F.; VIDOTO, E. L. G.; FORTULAN, C. A.; FONTES, S. R.....	130
PG-32A - Geração de terceiro harmônico em meios isotrópicos usando a técnica de varredura-Z	
BARBANO, Emerson Cristiano; ZILIO, Sérgio Carlos.....	131
PG-33A - Dinâmica de Heggemann-Krause em redes complexas	
BATISTA, Joao Luiz Bunoro; COSTA, Luciano da Fontoura.....	132
PG-34A - Diagnóstico de greening em citros utilizando técnicas fotônicas	
CARDINALI, Marcelo Camponez do Brasil; VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira.....	133
PG-35A - Elementos de circuito equivalente para bicamadas SWNT/PAMAM em estruturas EIS	
SOUSA, Marcos Antonio Moura de; SIQUEIRA JÚNIOR, José Roberto; VERCIK, Andres	134
PG-36A - Construção de campos de luz para TFD intersticial	
STRINGASCI, Mirian D.; MORIYAMA, Lilian T.; BAGNATO, Vanderelei S.; KURACHI, Cristina.....	135
PG-37A - Síntese e caracterização do sistema SrTi_{1-x}FexO₃	
PELISSARI, Pedro Ivo Batistel Galiote Brossi; SILVA, Luis Fernando da; BERNARDI, Maria Inês Basso; MASTELARO, Valmor Roberto.....	136
PG-38A - Síntese e caracterização de AgNPs conjugadas com peptídeos antimicrobianos	
BERTÉ, Rodrigo; LEITE, José R. S. A.....	137

PG-39A - Desenvolvimento de técnicas espectroscópicas e de microscopia óptica de alta resolução no acompanhamento da ação enzimática durante a hidrólise da biomassa	
COLETTA, V. C.; CONCEIÇÃO, F. R.; GALAN, D. C.; POLIKARPOV, I.; GUIMARÃES, F. E. G.....	138
PG-40A - Estudos de morfologia e dinâmica das cadeias de POE em polímeros dopados com Lítio	
BEZERRA, W. S.; AZEVEDO, E. R.; COBO, M. F.; FERREIRA, A. G.; BONAGAMBA, T. J.....	139
PG-41A - Imunossensores baseados em guias de onda planares para o diagnóstico de doenças negligenciadas	
FIGUEIREDO, Alessandra; VIEIRA, Nilton Cristi Silva; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo.....	140
PG-42A - Estudos estruturais de alosterismo enzimático usando métodos de simulação computacional	
CÂMARA, Amanda Souza; TEIXEIRA, Francesco Brugnera; REBOREDO, Eduardo Horjales.....	141
PG-43A - Inativação fotodinâmica de micro-organismos causadores de onicomicose	
SILVA, Ana Paula da; BORTOLET, Natalia Mayumi Inada	143
PG-44A - Faseamento experimental da proteína beta-galactosidase de <i>Bifidobacterium bifidum</i>	
GODOY, Andre Schutzer de; CAMILO, Cesar Moises; POLIKARPOV, Igor.....	144
PG-45A - Estudo estrutural de enzimas da via de salvação de purinas de <i>Schistosoma mansoni</i>	
SILVA NETO, Antônio Marinho da; GARRAT, Richard Charles	145
PG-46A - Expressão, purificação e caracterização molecular e estrutural de uma proteína quimera (domínios glicosilhidrolase e expansina) da bactéria <i>Xanthomonas campestris</i>	
TOMAZINI JUNIOR, Atílio; POLIKARPOV, Igor	146
PG-47A - Caracterização estrutural e funcional de FleQ de pseudomonas e xanthomonas: um importante fator de transcrição envolvido na expressão de genes flagelares e formação de biofilme	
MATSUYAMA, Bruno Yasui; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles.....	147
PG-48A - Estudos estruturais de xilose isomerase de <i>Lactobacillus crispatus</i>	
REIS, Caio Vinicius dos; POLIKARPOV, Igor	149
PG-49A - Nanopartículas core-shell superparamagnéticas para aplicação em medicina: hipertermia aplicada ao tratamento de câncer	
BALLESTEROS, Camilo Arturo Suárez; SANTOS, Fabricio A.; MARANGONI, Valéria Spolon; ZUCOLOTTO, Valtencir	151
PG-49B - Core-shell superparamagnetic nanoparticles for application in medicine: Hyperthermia applied to cancer treatment	
BALLESTEROS, Camilo Arturo Suárez; SANTOS, Fabricio A.; MARANGONI, Valéria Spolon; ZUCOLOTTO, Valtencir	152
PG-50A - Informação sensorial e o controle motor da direção de vôo em <i>Chrysomya megacephala</i>: uma abordagem sistêmica	
SILVÉRIO, Carolina Menezes; PINTO, Reynaldo Daniel; KOBERLE, Roland.....	153
PG-51A - Modificação da fluorescência de derivados de porfirina para aplicações em diagnóstico fotodinâmico – estudos “in vitro” e “in vivo”	
ANDRADE, Cintia Teles de; VOLLET FILHO, José Dirceu; SALVIO, Ana Gabriela; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina	155

PG-52A - Caracterização de proteínas codificadas por genes de micro-exon de <i>Schistosoma mansoni</i> Débora Orcia; DEMARCO, Ricardo	156
PG-53A - Estudos estruturais das poly(A)-binding proteins LIMA, Gustavo Machado Alvares de; DOTTA, Maria Amelia Villela Oliva; THIEMANN, Otavio Henrique.....	157
PG-54A - Modelagem molecular por homologia da P21 do Trypanosoma cruzi: uma hipótese a sua função MOREIRA, Heline Hellen Teixeira; REBOREDO, Eduardo Horjales	158
PG-55A - Estudo computacional da difusão térmica em proteínas termoestáveis MUNIZ, Heloisa dos Santos; MARTINEZ, Leandro	159
PG-55B - Computational study of thermal diffusion in thermostable proteins MUNIZ, Heloisa dos Santos; MARTINEZ, Leandro	160
PG-56A - Estudo do Efeito Vascular da Terapia Fotodinâmica usando o modelo de Membrana Corioalantóica BUZZA, Hilde Harb; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina	161
PG-57A - Triagem de condições de cristalização da Selenofosfato Sintetase de <i>Escherichia coli</i> SILVA, Ivan Rosa; FAIM, Livia Maria; BORGES, Julio Cesar; THIEMANN, Otavio Henrique	162
PG-57B - Screening of crystallization conditions of <i>Escherichia coli</i> Selenophosphate Synthetase SILVA, Ivan Rosa; FAIM, Livia Maria; BORGES, Julio Cesar; THIEMANN, Otavio Henrique	163
PG-58A - Aplicação de drogas em tempo real e dependente do padrão a centros geradores de padrões SANTOS, Jessica dos; PINTO, Reynaldo Daniel.....	164
PG-59A - Uma nova modificação cristalina do fármaco antirretroviral Lamivudina TENORIO, Juan Carlos; ELLENA, Javier Alcides	165
PG-60A - Estrutura em complexo com tubercidina e constantes catalíticas da enzima Metiltioadenosina Fosforilase (MTAP) de <i>Schistosoma mansoni</i> SOUZA, Juliana Roberta Torini de; DE MARCO, Ricardo; GARRATT, Richard Charles; PEREIRA, Humberto D'Muniz	166
PG-61A - Caracterização de estado sólido do Fármaco Estradiol 17β Valerato PAULA, Karina de; ELLENA, Javier Alcides	167
PG-62A - Avaliação da terapia fotodinâmica em lesões cutâneas e subcutâneas de pitiose experimental em coelhos PIRES, Layla; BOSCO, Sandra de Moraes Gimenes; BAGNATO, Vanderlei Salvador; KURACHI, Cristina	168
PG-63A - Cultivo e seleção de bactérias anaeróbias termofílicas fermentadoras a partir de amostras de reservatórios de petróleo GODOI, Leandro Bardivieso; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini	169
PG-64A - Dinâmica molecular e redes complexas no estudo de proteínas termoestáveis CENSONI, Luciano Borges; MARTÍNEZ, Leandro	170
PG-64B - Molecular dynamics and complex networks in the study of protein stability CENSONI, Luciano Borges; MARTÍNEZ, Leandro.....	171
PG-65A - Estudos biofísicos e bioquímicos da celulase Cellobiohidrolase II de <i>Trichoderma harzianum</i> 3844 VOLTATODIO, Maria Luiza; POLIKARPOV, Igor	172

PG-66A - Triagem virtual de candidatos a novos inibidores da enzima cruzaína de <i>Trypanosoma cruzi</i> SOUZA, Mariana Laureano de; ANDRICOPULO, Adriano Defini	174
PG-67A - Avaliação bioquímica de uma série de derivados de chalconas e semicarbazonas candidatos a inibidores de cruzaína LEITE, Mariane; ANDRICOPULO, Adriano Defini	176
PG-68A - Compreensão da estrutura de proteínas por estudantes de nível superior, na perspectiva dos modelos mentais SILVA, Marília Faustino da; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini	177
PG-69A - Estudos funcionais e estruturais da classe de enzimas endoglucanase GHF45 aplicados ao desenvolvimento de coquetéis enzimáticos RAMIA, Marina Paglione; LANDGRAFF, Ana Carolina Mafud	178
PG-70A - Caracterização molecular e atividade catalítica da mevalonato kinase de <i>trypansosoma cruzi</i> DERIGGI, Maycou Alberto; REBOREDO, Eduardo Horjales; MORTARA, Renato A.; BAHIA, Diana; FERREIRA, Éden R.	180
PG-71A - Estudo espectroscópico e termodinâmico da correlação estrutura-função da enzima Clorocatecol 1,2-dioxigenase de <i>Pseudomonas putida</i> MESQUITA, Nathalya Cristina de Moraes Roso; DYSZY, Fábio; COSTA FILHO, Antonio José da	181
PG-72A - Fabricação de micro-ambientes para a investigação de crescimento e diferenciação celular SALAS, Oriana Inés Avila; MENDONÇA, Cleber Renato	183
PG-73A - Desenvolvimento de estímulos dinâmicos térmicos para análise do sistema sensorial infravermelho em serpentes BATISTA, Renata da Fonseca Moraes; SLAETS, Jan Frans Willem; PINTO, Reynaldo Daniel; ANDRADE, Denis O. Vieira de	184
PG-74A - Estudos espectroscópicos da proteína Peld de <i>Pseudomonas aeruginosa</i>, envolvida em vias de sinalização celular responsável pela formação de biofilmes SILVA, Sumária Sousa; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles.....	186
PG-75A - Caracterização da Enterococcal leucine-rich protein A (ElrA) de <i>Enterococcus faecalis</i> MERLO, Thaís Panhan; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha; NASCIMENTO, Alessandro Silva ; SERROR, Pascale.....	187
PG-76A - Desenvolvimento de genossensor contendo oligonucleotídeos funcionalizados e AuNPs para aplicação no diagnóstico precoce da hipertensão arterial ROLIM, Thalita; ZUCOLOTTO, Valtencir	189
PG-76B - Development of genosensors containing functionalized oligonucleotides and AuNPs for early diagnosis of blood hypertension ROLIM, Thalita; ZUCOLOTTO, Valtencir	190
PG-77A - Nanobiocompósitos contendo nanoparticulas e proteínas para aplicações biomédicas MARANGONI, Valéria S.; PAINO, Ieda; ZUCOLOTTO, Valtencir.....	191
PG-77B - Nanobiocomposites containing nanoparticles and proteins for medical applications MARANGONI, Valéria S.; PAINO, Ieda; ZUCOLOTTO, Valtencir.....	192

PG-78A - Determinação estrutural do complexo Selenocisteína Sintase t-RNA de <i>E.coli</i> SERRÃO, V. H. B.; MANZINE, L. R.; SILVA, I. R ; PORTUGAL, R. V.; THIEMANN, O. H	193
PG-78B - Structural determination of selenocysteine synthase t-RNA complex from <i>E. coli</i> SERRÃO, V. H. B.; MANZINE, L. R.; SILVA, I. R; PORTUGAL, R. V.; THIEMANN, O. H	194
PG-79A - Desenvolvimento de um genossensor de baixo custo e resposta rápida CORRER, W. R.; ZUCOLOTTO, V.....	195
PG-79B - Development of a low-cost and fast-response genosensor CORRER, W. R.; ZUCOLOTTO, V.....	196
PG-80A - Análise e caracterização de nanoestruturas de polímeros mediante imagens AFM GUILLEN, Carolina; PEREIRA-DA-SILVA, Marcelo; BRUNO, Odemir Martinez.....	197
PG-81A - Estudo da influência topológica na dinâmica integra-e-dispara em redes neurais artificiais COMIN, Cesar Henrique; COSTA, Luciano da Fontoura.....	199
PG-82A - Espectroscopia por ressonância magnética resolvida no tempo através do método FDM SILVA, Cíntia Maira Pereira da; MAGON, Claudio José; TANNÚS, Alberto.....	200
PG-83A - Interface gestual baseada em visão computacional PRADO NETO, Elias Ximenes do; BRUNO, Odemir Martinez.....	202
PG-84A - Variações termodinâmicas em superfluidos atômicos contendo vórtices BAGNATO, Guilherme de Guzzi; TELLES, Gustavo Deczka	204
PG-85A – Estrutura atômica de nanopartículas utilizando o algoritmo Basin-Hopping Monte Carlo RONDINA, Gustavo G.; SILVA, Juarez L. F. da	205
PG-85B - Atomic structure of nanoparticles using the Basin-Hopping Monte Carlo algorithm RONDINA, Gustavo G.; SILVA, Juarez L. F. da	206
PG-86A - Análise de algoritmos distribuídos para escalonamento em grades de dados LOURENÇO, Gustavo Vilaça; TRAVIESO, G.	207
PG-87A - Processamento digital de sinais aplicado ao projeto de função de transferência inteligente para a solução de tempos de relaxação em problemas de RMN QUEIROZ, Guylherme Emmanuel Tagliaferro de; GUIDO, Rodrigo C.....	208
PG-88A - Influência de modelos de interação hâdronica na medida de composição de raios cósmicos SOARES, Hendrik; DE SOUZA, Vitor.....	209
PG-89A - Características locais no tráfego de pacotes em redes complexas próximo ao ponto de congestionamento CARUSO, J. S.; TRAVIESO, G.....	210
PG-90A - Transformada wavelet aplicada na extração das características do ruído emitido pela caneta ao assinar ESCOLA, João Paulo Lemos; GUIDO, Rodrigo Capobianco.....	211
PG-91A - Modelagem de mercado financeiro através de redes complexas SILVA JUNIOR, Luiz Gonzaga da; TRAVIESO, Gonzalo.....	212

PG-92A - Programação de um sistema de controle de RF e aquisição de dados para um espectrômetro de RMN de baixo custo	
ANDREETA, Mariane Barsi; D'EURYDICE, Marcel Nogueira; VIDOTO, Edson L. G.; BONAGAMBA, Tito José	213
PG-93A - Autômato celular: criptografia baseada no modelo de vida artificial	
JUSTO, Marina Jeaneth Machicao; BRUNO, Odemir M.	214
PG-94A - GaAs δ-doped: comparação entre as estruturas da banda de valência das fases zincblend e wurtzita	
FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de; SIPAHI, Guilherme Matos.....	215
PG-95A - Som e Código Aberto	
FABBRI, Renato; COSTA, Luciano da Fontoura; OLIVEIRA JÚNIOR, Osvaldo Novais de	216
PG-96A – Análise do comportamento coletivo em redes complexas do mercado financeiro	
PERON, Thomas; RODRIGUES, Francisco Aparecido	217
PG-97A - Simulação de sistemas semicondutores com computação heterogênea	
CAMPOS, Tiago de; SIPAHI, Guilherme Matos.....	218
PG-98A - Métricas para filosofia e música	
SILVA JUNIOR, Vilson Vieira da; FABBRI, Renato; COSTA, Luciano da Fontoura.....	219
PG-99A - Indo além da teoria de Forster em semicondutores orgânicos no estado sólido	
FACETO, Angelo Danilo; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo	220
PG-99B - Going beyond Forster energy transfer theory in solid state organic semiconductors	
FACETO, Angelo Danilo; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo	221
PG-100A - Técnicas de RMN para estudos de materiais de interesse energético	
ARAUJO-FERREIRA, Arthur Gustavo de; VIDOTO, Edson Luiz Gea; AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de; BONAGAMBA, Tito José	222
PG-101A - Aprisionamento de átomos e dímeros de Rb em uma armadilha óptica	
MARANGONI, Bruno Spolon; MENEGATTI, Carlos Renato; MARCASSA, Luis Gustavo	223
PG-102A - Descrição de medidas em sistemas de 2 níveis pela equação de Lindblad com inclusão de ambiente	
BRASIL, Carlos Alexandre; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus.....	224
PG-102B - Analysis of the environmental influence on the measurement process of a qubit system	
BRASIL, Carlos Alexandre; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus.....	226
PG-103A – Obtenção e polarização de bases Gaussianas relativísticas para cálculos atômicos e moleculares com átomos pesados	
TARGON, Cristiane Godoy; SILVA, Albérico Borges Ferreira da Silva.....	228
PG-104A - Absorção cooperativa de dois fótons por átomos de sódio numa armadilha magneto-óptica	
PEDROZO, Edwin Eduardo; PAIVA, Rafael Rothganger; MAGALHÃES, Kilia Mayre Farias; BAGNATO, Vanderlei Salvador	229
PG-105A - Interação entre um ponto quântico de InAs com plasmon polariton de superfície numa interface metal semicondutor	
SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar; MAREGA JUNIOR, Euclides	231

PG-106A - Indução magnética produzida por uma amostra quântica mesoscópica	
SEMAN, Jorge Amín; CASTILHO, Patricia.....	232
PG107A - Tunelamento dissipativo não-local para transferência de estados com alta fidelidade	
MORAES NETO, Gentil Dias de; MOUSSA, Miled Hassan Youssef	233
PG107B - Nonlocal dissipative tunneling for high-fidelity quantum state transfer between distant parties	
MORAES NETO, Gentil Dias de; MOUSSA, Miled Hassan Youssef	234
PG-108A - Uma generalização do modelo de spins e bósons para a transcrição de genes sob múltiplo controle	
INNOCENTINI, Guilherme da Costa Pereira; HORNOS, José Eduardo Martinho.....	235
PG-109A - Um modelo estocástico para a transcrição dos genes de segmentação da <i>Drosophila melanogaster</i>	
PRATA, Guilherme; HORNOS, José Eduardo Martinho.....	236
PG-110A - Colisão de átomos de Rydberg frios em uma armadilha de dipolo	
CABRAL, Jader de Souza; KONDO, Jorge D. M.; GONÇALVES, Luis Felipe; MARCASSA, Luis Gustavo.....	237
PG-111A – Geração de alto fluxo de harmônicos de alta ordem com pulsos de femtosegundo ultra-intensos	
SIQUEIRA, Jonathas de Paula; MISOGUTI, Lino	238
PG-112A - Interações entre átomos de Rydberg em sistemas unidimensionais e bidimensionais	
KONDO, J. D. M. ; MARCASSA, L. G.	239
PG-113A - Criticalidade auto-organizada em avalanches neurais	
SANTAMARIA, Julian Andres Jaimes; MAIA, Leonardo Paulo	240
PG-114A - Revisão do efeito da mídia no modelo de Axelrod	
PERES, Lucas Vieira Guerreiro Rodrigues; FONTANARI, José Fernando	241
PG-115A - Amplificando os efeitos do movimento molecular em experimentos DIPSHIFT-like	
COBO, Marcio Fernando; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de; ACHILLES, Anja; REICHERT, Detlef ; SAALWAECHTER, Kay	242
PG-115B - Amplifying the effects of molecular motion in DIPSHIFT-like experiments	
COBO, Marcio Fernando; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de; ACHILLES, Anja; REICHERT, Detlef; SAALWAECHTER, Kay	243
PG-116A - Ressonância de spin induzida por Zitterbewegung em fios quânticos	
HACHIYA, Marco O.; USAJ, Gonzalo; EGUES, J. Carlos.....	244
PG-117A - Vórtices e turbulência em condensados de Bose-Einstein	
CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, Vanderlei Salvador	245
PG-117B - Vortices and turbulence in Bose-Einstein condensates	
CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, Vanderlei Salvador	246
PG-118A – Processo de nanopartículas de Au induzida por pulsos laser de femtossegundos formatados	
FERREIRA, Paulo Henrique Dias; SIQUEIRA, Jonathas de Paula; VIVAS, Marcelo Gonçalves; BONI, Leonardo de; MISOGUTI, Lino; MENDONÇA, Cleber Renato	247
PG-119A - Intereração spin-órbita em poços quânticos com estrutura wurtzita	
PENTEADO, Poliana H.; FU, Jiyong; BERNARDES, Esmerindo; EGUES, J. Carlos	248

PG-119B - Spin-orbit coupling in InAs-based wurtzite quantum wells	
PENTEADO, Poliana H.; FU, Jiyong; BERNARDES, Esmerindo; EGUES, J. Carlos.....	250
PG-120A - Estudo da absorção de dois fótons em colisões frias	
PAIVA, Rafael Rothganger de; PEÑAFIEL, Edwin Pedrozo; VIVANCO, Franklin Adán Julca; MAGALHAES, Kilvia Mayre Farias; BAGNATO, Vanderlei Salvador.....	251
PG-121A - Transição para turbulência quântica em superfluidos finitos	
SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo; TELLES, Gustavo; YUKALOV, Vyacheslav; BAGNATO, Vanderlei Salvador	252
PG-121B - Transition to quantum turbulence in finite size superfluids	
SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo; TELLES, Gustavo; YUKALOV, Vyacheslav; BAGNATO, Vanderlei Salvador	253
PG-122A - Métodos alternativos para obtenção de meios ativos para lasers de corante em estado sólido	
QUEIROZ, Thiago B. de; BOTELHO, Moema de Barros e Silva; ECKERT, Hellmut; BERNARDEZ, CAMARGO, Andréa Simone Stucchi de	254
PG-122B - Alternative methods to prepare Rh6G laser dye solid state materials based on ion exchange process or π-π stacking	
QUEIROZ, Thiago B. de; BOTELHO, Moema de Barros e Silva; ECKERT, Hellmut; BERNARDEZ, CAMARGO, Andréa Simone Stucchi de	255
PG-123A – Modelo de Kinouchi-Copelli como um processo de ramificação: criticalidade e emergência de avalanches	
MOSQUEIRO, Thiago S.;MAIA, Leonardo P.; AKIMUSHKIN, Camilo	256
PG-123B – Kinouchi-Copelli model as Branching Process: Criticality and Emergence of Avalanches	
MOSQUEIRO, Thiago S.;MAIA, Leonardo P.; AKIMUSHKIN, Camilo	257
PG-124A - Caracterização de microestruturas fabricadas via polimerização por dois fótons usando microscopia CARS	
TRIBUZI, Vinicius; BALDACCHINI, Tommaso; ZADOYAN, Ruben; MENDONÇA, Cleber Renato.....	258
PG-125A – Despertando a energia do vácuo	
LIMA, W. C. C.; VANZELLA, D. A.T	260
PG-125B - Awaking the vacuum energy	
LIMA, W. C. C.; VANZELLA, D. A.T	261
PG-126A - Propriedades estruturais e fotoluminescentes de pós do sistema YAG-SiO₂: Er obtidos pelo método dos precursores poliméricos	
MENDES, Alessandra Carla; HERNANDES, Antonio Carlos; MAIA, Lauro June Queiroz; CARVALHO, Jesiel Freitas; LI, Máximo Siu	262
PG-127A - Estudo de transistores de efeito de campo orgânicos do tipo-p para aplicação em eletrônica flexível	
MACIEL, Alexandre de Castro; FARIA, Roberto Mendonça	263
PG-127B - Study of p-type organic field effect transistors to application in flexible electronics	
MACIEL, Alexandre de Castro; FARIA, Roberto Mendonça	264
PG-128A – Desenvolvimento de cimento sustentável: Tecnologia de baixo carbono através da nanociência	
CHAVES, Anderson Silva; Milton Ferreira de Souza	265

PG-128B – Nanoengineering green cement: Low carbon technology through nanoscience CHAVES, Anderson Silva; Milton Ferreira de Souza.....	267
PG-129A - Síntese do composto SrTi(1-x)W_xO(3+x) (x=0, 1) através do método dos precursores poliméricos ESCANHOELA JÚNIOR, Carlos Augusto; MASTELARO, Valmor Roberto	269
PG-130A - Desenvolvimento de métodos avançados em RMN em campo externo nulo para o estudo de materiais magnéticos via RMN ASCONA, Christian Rivera; SILVA, Rodrigo de Oliveria; CARVALHO, João Teles de; TOZONI, José Roberto; VIDOTO, Edson Luiz Géa; BONAGAMBA, Tito Jose.....	270
PG-131A - Desenvolvimento de Espectrômetros de Ressonância Magnética e Quadrupolar Nuclear para aplicações em Ciência do Petróleo, Ciência dos Materiais e Informação Quântica BRAZ, Daniel Cesar; VIDOTO, Edson Luiz Gea; BONAGAMBA, Tito José	271
PG-132A - Células fotovoltaicas híbridas: arquiteturas baseadas em efeitos fotônicos e plasmônicos COUTINHO, Douglas José; FARIA, Roberto Mendonça.....	272
PG-133A - Monitoramento óptico do processo de sacarificação e fermentação do mosto cervejeiro em tempo real ESTRACANHOLLI, Éverton Sérgio; KURACHI, Cristina; POLIKARPOV, Igor; BAGNATO, Vanderlei Salvador	273
PG-133B - Optical monitoring of wort saccharification and fermentation in real time ESTRACANHOLLI, Éverton Sérgio; KURACHI, Cristina; POLIKARPOV, Igor; BAGNATO,Vanderlei Salvador	274
PG-134A - Fotofísica de sistemas moleculares automontado na superfície de nanopartículas e sua aplicação em sistemas biológicos e em tratamentos medicinais TSUTAE, Fernando Massayuki; GUIMARAES, Francisco Eduardo Gontijo	275
PG-135A - Estrutura e dinâmica molecular de poly(9,9-dioctylfluoren-2,7-diyl-co-benzothiadiazole) (F8BT) e correlações com propriedades elétricas FARIA, Gregório Couto; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de	277
PG-136A - Desenvolvimento de microcavidades ópticas com janelas de transmissão no visível e infravermelho próximo GALLO, Ivan Braga; ZANATTA, Antonio Ricardo.....	278
PG-136B - Development of optical microcavities with transmission windows in the visible and near-infrared GALLO, Ivan Braga; ZANATTA, Antonio Ricardo.....	279
PG-137A - Possibilidade de predição em tempo real da terapia fotodinâmica – correlação da espectroscopia de fluorescência e profundidade de necrose VOLLET FILHO, José Dirceu; MORIYAMA, Lilian Tan; GRECCO, Clóvis; FERREIRA, Juliana; KURACHI, Cristina; BAGNATO, Vanderlei Salvador	280
PG-138A - Imobilização de metaloftalocianinas e nanotubos de carbono em filmes nanoestruturados para aplicações em biosensores CENTURION, Lilian Maria Pessoa da Cruz; ZUCOLOTTO, Valtencir	281

FALEIROS, Marcelo Meira; MIRANDA, Paulo Barbeitas	282
PG-140A - Ambientes químicos de ácido tungstofosfórico hexahidratado estudados por ressonância magnética nuclear em estado sólido de ^1H e ^{31}P OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de Oliveira; SCHNEIDER, José Fabian	283
PG-140B - Chemical environments of tungstophosphoric acid hexahydrate studied by NMR OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de Oliveira; SCHNEIDER, José Fabian	284
PG-141A - Obtenção de materiais luminescentes via incorporação de complexos de európio em matrizes híbridas mesoporosas BOTELHO, Moema; QUEIROZ, Thiago B. de; GALVEZ, Maria Dolores; COLA, L. de; ECKERT, Hellmut; BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo Alvarez	285
PG-141B - Alternative approaches for the encapsulation of luminescent europium complexes in hybrid mesoporous hosts towards new optical materials BOTELHO, Moema; QUEIROZ, Thiago B. de; GALVEZ, Maria Dolores; COLA, L. de; ECKERT, Hellmut; BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo Alvarez	286
PG-142A - Sensores e biossensores de feito de campo utilizando filmes automontados nanoestruturados VIEIRA, Nirton Cristi Silva; ZUCOLOTTO, Valtencir; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo.....	287
PG-143A - Estudo espectroscópico da dinâmica molecular e empacotamento em semicondutores orgânicos BERNARDINELLI, O. D.; AZEVEDO, E. R.	288
PG-144A - Utilização de ressonância quadrupolar nuclear para o estudo de materiais com técnicas uni- e bidimensionais e implementação de informação quântica POLLI, Roberson Saraiva; OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo de; VIDOTO, Edson Luiz Gea; AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de; OLIVEIRA, Everton Lucas de; PINTO, Diogo de Oliveira Soares; TELES, João; BONAGAMBA, Tito José	289
PG-145A - Ecos de múltiplo-quantum e seleção de coerências no GdAl_2 utilizando RMN em campo-zero OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo de; TELES, João; RIVERA-ASCONA, Christian; TOZONI, José Roberto; VIDOTO, Edson Luiz Géa; BONAGAMBA, Tito José.....	291
PG-146A - Montagem e caracterização de um laser de Cr: LiCAF para microscopia de fluorescência por dois fôtons PRATAVIEIRA, Sebastião; BAGNATO, Vanderlei Salvador; MISOGUTI, Lino	292
PG-147A - Propriedades elétricas de compósito cerâmico de $\text{BaZr}_{0,15}\text{Ti}_{0,75}\text{O}_3$ - $\text{Ba}_{0,77}\text{Ca}_{0,23}\text{TiO}_3$ AMARAL, Thiago Martins; GUALBERTO, Alan Rodrigo Marinho; ANTONELLI, Eduardo; HERNANDES, Antonio Carlos	293
PG-148A - Desenvolvimento de técnicas de precessão livre no estado estacionário (SSFP) com alternância de fase para aquisição rápida de espectros de RMN em alta resolução MORAES, Tiago Bueno de; COLNAGO, Luiz Alberto	294
PG-149A - Estudo dos transistores de efeito de campo orgânicos SOUSA, Washington da Silva; MACIEL, Alexandre de Castro; Roberto Mendonça Faria	295

PG-150A - Estudos cristalográficos e funcionais do hPPARα LBD em complexo com ligantes naturais e sintéticos	
BERNARDES, Amanda; MUNIZ, João Renato Carvalho; GODOY, André S.; POLIKARPOV, Igor	296
PG-151A - Avaliação da formação de agregados e estudos estruturais de septinas de <i>Schistosoma mansoni</i>	
ZERAIK, Ana Eliza; ARAUJO, Ana Paula Ulian de; DE MARCO, Ricardo	297
PG-151B - Conformational and aggregation studies of <i>Schistosoma mansoni</i> septins	
ZERAIK, Ana Eliza; ARAUJO, Ana Paula Ulian de; DE MARCO, Ricardo.....	298
PG-152A - Respiração do solo na cultura de cana-de açucar segundo diferentes manejos	
CARVALHO, Camila Miranda; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira	299
PG-153A - Cristalização, cocristalização, caracterização de estado sólido e avaliação de novos polimorfos de fármacos antineoplásicos	
SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da ; ELLENA, Javier.....	300
PG-154A - Resposta fotodinâmica com pulsos ultracurtos	
GRECCO, Clóvis; KURACHI, Cristina.....	301
PG-155A - Análises do estado oligomérico e da massa molecular da seril tRNA sintetase de <i>Trypanosoma brucei</i> por cromatografia de exclusão molecular e espalhamento de luz dinâmico	
MARTIL, D. E.; THIEMANN, O. H.....	302
PG-156A - Interação da porfirina catiônica meso-tetrakis (4-N-metilpiridil) com vesículas de fosfolipídio nos estados gel e líquido cristalino	
DE SOUSA NETO, Diógenes de; TABAK, Marcel	303
PG-156B - Interaction of the cationic meso-tetrakis (4-N-methylpyridyl) porphyrin with gel and liquid crystalline state phospholipid vesicles	
DE SOUSA NETO, Diógenes de; TABAK, Marcel	304
PG-157A - Bases estruturais da seletividade hPPARβ-LBD:GW0742	
BATISTA, F.A.H.; TRIVELLA, D. B. B.; BERNARDES, Amanda; FIGUEIRA, A.C.M.; OLIVEIRA, P. S. L.; GRATIERI, J.; WEBB, P.; POLIKARPOV, Igor	305
PG-158A - Estudos em biologia estrutural da enzima Heme Oxigenase de <i>Plasmodium falciparum</i> - alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de fármacos antimaláricos	
MALUF, Fernando Vasconcelos; GARCIA, Celia R. S.; OLIVA, Glauclius; GUIDO, Rafael V. C.	306
PG-159A - Estudos bioquímicos e biofísicos da celulase Cellobiohidrolase I de <i>Trichoderma harzianum</i> it 3844	
COLUSSI, Francieli; POLIKARPOV, Igor.....	308
PG-160A - Planejamento de inibidores da enzima cruzaína candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas	
PAULI, Ivani; ANDRICOPULO, Adriano D	309
PG-161A - Estudos estruturais dos receptores nucleares PPARα e PPARγ	
SANTOS, Jad米尔son Celestino dos; Bernardes, Amanda; PUHL, Ana Cristina; POLIKARPOV, Igor	310
PG-162A - Caracterização molecular e estrutural da selenoproteínas de <i>Trypanosoma brucei</i>	
EVANGELISTA, J.P.; THIEMANN, O. H.....	312

PG-163A - Estrutura cristalográfica da subunidade d da hemoglobina gigante de <i>Glossoscolex paulistus</i> BACHEGA, José Fernando Ruggiero; GARRATT, Richard Charles.....	313
PG-164A - Interações com lipídeos não específicos induzem a formação de estruturas ricas em folhas-β em SEPT2, que podem estar relacionadas a amilóides DAMALIO, Julio Cesar Pissuti; NOBRE, Thatyane Morimoto; GARRATT, Richard Charles; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de; ARAUJO, Ana Paula Ulian de.....	314
PG-165A - Planejamento racional de novos inibidores das enzimas Aldolase e Fosfofrutoquinase de <i>Trypanosoma brucei</i> FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes; ANDRICOPULO, Adriano Defini; THIEMANN, Otávio Henrique	315
PG-166A - Estudos biofísicos da selenofosfato sintetase (SPS2) de <i>Trypanosoma brucei</i> and <i>Leishmania major</i> FAIM, L. M.; SILVA, I. R; DIAS M. V. B; BLUNDELL, T; BORGES, J.C.; THIEMANN, O. H.....	316
PG-166B - Biophysical Studies of selenophosphate synthetase (SPS2) from <i>Trypanosoma brucei</i> and <i>Leishmania major</i> FAIM, L. M; SILVA, I. R; DIAS M. V. B ² ; BLUNDELL, T; BORGES, J.C.; THIEMANN, O. H.	318
PG-167A - Identificação de elementos estruturais no tRNAsécuca determinantes da ligação com proteínas MANZINE, Livia Regina; SERRÃO, Vitor Hugo Balsco; SOUZA, M. M.; THIEMANN, Otavio Henrique	320
PG-168A - Efeitos da terapia fotodinâmica em células sadias e células neoplásicos após múltiplas aplicações SABINO, Luis Gustavo; KURACHI, Cristina	321
PG-169A - Recuperação de atividade enzimática por reconstrução de porção aminoterinal LIBERATO, Marcelo Vizoná; POLIKARPOV, Igor.....	323
PG-170A - Expressão purificação e caracterização da proteína U5-15K de <i>Trypanosoma brucei</i> SOUZA, M. M.; LIMA, A. L.; MARTIL, D. E.; SILVA, M. T. A.; THIEMANN, O. H.	324
PG-171A - Caracterização molecular da proteína poly(A)-binding protein de <i>Trypanosoma brucei</i> OLIVA, Maria Amélia; THIEMANN, Otavio H.	325
PG-172A - Caracterização química e morfológica do bagaço de cana-de-açúcar submetido a diferentes condições de deslignificação para uma maior eficiência durante a hidrólise enzimática LIMA, Marisa Aparecida de; REZENDE, Camila Alves; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de; POLIKARPOV, Igor.326	326
PG-173A - Domínios de reconhecimento de carboidratos desempenham diferentes papéis na função de Galectinas KUMAGAI, Patricia Suemy; DYSZY, Fábio Henrique; NONATO, Maria Cristina; BARUFFI, Marcelo Dias; COSTA FILHO, Antonio José da.....	328
PG-173B - Carbohydrate recognition domains play different roles in Galectin function KUMAGAI, Patricia Suemy; DYSZY, Fábio Henrique; NONATO, Maria Cristina; BARUFFI, Marcelo Dias; COSTA FILHO, Antonio José da.....	329
PG-174A - Estudos integrados de biologia molecular e estrutural da proteína fascina: um importante alvo molecular para o desenvolvimento de novos fármacos anticâncer SANTOS, Ricardo Nascimento dos; DUARTE, Simone Michelan; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho; ANDRICOPULO, Adriano Defini	330

PG-175A - Avaliação do efeito fotodinâmico a partir da associação de diferentes fotossensibilizadores FERRAZ, Ruy Carvalho Mattosinho de Castro; KURACHI, Cristina.....	332
PG-176A - Produção, purificação e caracterização molecular e estrutural da endoglucanase do fungo <i>Trichoderma harzianum</i> PELLEGRINI, V. O. A.; SILVA, F. H.; POLIKARPOV, I.	333
PG-177A - Expressão heteróloga de celulases em <i>Aspergillus niger</i> SERPA, Viviane; TSANG, Adrian; POLIKARPOV, Igor	334
PG-178A - Triagem biológica de galatos de alquila na identificação de inibidores de metástase em células de câncer de mama ALTEI, Wanessa Fernanda; REGASINI, Luis Octavio; BOLZANI, Vanderlan da Silva; ANDRICOPULO, Adriano Defini	336
PG-179A - Estudo Estrutural da proteína “Old Yellow Enzyme” de <i>Trypanosoma cruzi</i> RODRIGUES, Nathalia de Campos; CANDURI, Fernanda; OLIVA, Glaucius; BORGES, Júlio César	338
PG-180A - Isoenzimas de <i>Streptomyces clavuligerus</i> envolvidas na biossíntese de ácido clavulânico: uma abordagem estrutural e funcional VIEIRA, Débora Fernanda; ARAUJO, Ana Paula U. de	339
PG-181A - Extrairando características locais e globais de texturas por redes complexas CASANOVA, Dalcimar; BRUNO, Odemir Martinez.....	341
PG-182A - Estudo comparativo da arquitetura dos genomas de <i>Schistosoma mansoni</i> e <i>Schistosoma japonicum</i> utilizando recursos bioinformáticos JACINTO, Daniele Santini; DEMARCO, Ricardo	342
PG-183A - Caracterização de gêneros musicais por redes complexas CORRÊA, Débora Cristina; COSTA, Luciano da Fontoura.....	344
PG-183B - Finding community structure in music genres networks CORRÊA, Débora Cristina; COSTA, Luciano da Fontoura.....	346
PG-184A - Reconhecimento de autoria em textos escritos usando redes complexas AMANCIO, D. R.; ALTMANN, E. G.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; COSTA, L. F.	348
PG-185A - Redes complexas geográficas n-dimensionais SILVA, Filipi Nascimento; COSTA, Luciano da Fontoura.....	350
PG-186A - Tomógrafo de espalhamento compton para estudos da física de solos em ambiente de campo SCANNAVINO JUNIOR, Francisco de Assis; CRUVINEL, Paulo Estevão	352
PG-187A - Estudo da influência da temperatura no ritmo de padrões em circuitos neuronais simples PHILIPPSEN, Gisele Strieder; PINTO, Reynaldo Daniel.....	353
PG-188A - Modelagem de grãos confinados em envólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem RIGO, Gustavo Vrech; COSTA, Luciano da Fontoura	354
PG-189A - Descritores fractais aplicados a análise de texturas FLORINDO, João Batista; BRUNO, Odemir Martinez	356

PG-190A - Sistema eletrônico integrado de estímulo, monitoramento e aquisição de dados em tempo real para experimentos com o duto óptico da mosca	
ALMEIDA, Lirio Onofre Baptista de; SLAETS, Jan Frans Willen	357
PG-191A - Estudo de uma rede complexa integrada da bactéria <i>Escherichia coli</i>	
ANTIQUEIRA, Lucas; COSTA, Luciano da Fontoura.....	358
PG-192A - Classificação de patologias na laringe baseada em classificadores	
RODRIGUES, Luciene Cavalcanti; GUIDO, Rodrigo Capobianco.....	360
PG-193A - Morphlet: uma nova família de transformadas wavelet aplicadas ao processo de conversão de voz	
VIEIRA, Lucimar Sasso; GUIDO, Rodrigo Capobianco	361
PG-194A - Filtro de Kalman com redes neurais embarcado em uma FPGA para projeções da Ciência do Solo	
LAIA, Marcos Antonio de Matos; CRUVINEL, Paulo Estevão	362
PG-195A - Caracterização e classificação de texturas baseada na representação por redes complexas de um conjunto de sub-amostragens de imagens	
FALVO, Maurício; BRUNO, Odemir Martinez.....	364
PG-196A - Estudo da forma, função e expressão gênica em neurociência	
MIAZAKI, Mauro; COSTA, Luciano da Fontoura.....	366
PG-197A - Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco <i>Gymnotus carapo</i>	
MATIAS, Paulo; SLAETS, Jan Frans Willem.....	367
PG-198A - Interação entre duas dinâmicas em uma rede complexa: atividade neuronal e processos epidêmicos	
SILVA, Renato Aparecido Pimentel da; VIANA, Matheus Palhares; COSTA, Luciano da Fontoura	369
PG-199A - Propagação e perdas de energia de Raios Cósmicos Ultra Energéticos	
ANJOS, Rita de Cássia dos; SOUZA, Luiz Vitor de Souza	370
PG-200A - Identificação de patologias na laringe com base na Discriminative Paraconsistent Machine (DPM)	
BARBON JUNIOR, Sylvio; GUIDO, Rodrigo Capobianco	371
PG-200B - Laryngeal pathologies Identification based on Discriminative Paraconsistent Machine (DPM)	
BARBON JUNIOR, Sylvio; GUIDO, Rodrigo Capobianco	372
PG-201A – Dimensão fractal de comunidades de pixels aplicada a análise de texturas	
GONÇALVES, Wesley Nunes; BRUNO, Odemir Martinez	373
PG-202A – Precessão de um vórtice tipo linha num condensado de Bose-Einstein	
TELES, R. P.; DOS SANTOS, F. E. A.; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.	374
P203A - Teorias de calibre e teorias integráveis no espaço dos laços	
LUCHINI, G.; FERREIRA, L. A.	374
P203B - Gauge and integrable theories in loop space	
LUCHINI, G.; FERREIRA, L. A.	374
P204A - Estudo computacional da dependência com a temperatura da solvatação de cadeias laterais de aminoácidos naturais e implicações na termoestabilidade de proteínas	
BATISTA, Mariana Raquel Bunoro; MARTÍNEZ, Leandro	374



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

IC-1A - Modelo de potencial para o bottomônio

SERRONE, Willian Matioli¹; MENDES, Tereza Cristina da Rocha¹

willian.matioli@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O presente trabalho visa estudar estados ligados de quarks pesados, mais especificamente o bottomônio (estado ligado de um quark bottom e um antiquark bottom). Em tais sistemas, efeitos relativísticos se tornam pequenos (1). Assim, a equação que descreve o estado ligado (equação de Bethe-Salpeter), quando impõe a aproximação para o regime não-relativístico, se transforma na equação de Schrödinger (2). O potencial a ser utilizado pode ser obtido considerando a aproximação na qual os quarks interagem predominantemente pela troca de um único glúon, e adicionado-se a este potencial um termo linear de confinamento (2). Este potencial terá alguns parâmetros livres que poderão ser ajustados para que as autoenergias obtidas pela resolução da equação de Schrödinger coincida com os resultados experimentais. O objetivo deste trabalho é encontrar os parâmetros do potencial sugerido em (2). Para isto, escolhe-se valores iniciais para estes parâmetros, e integra-se numericamente a Equação de Schrödinger pelo método de Runge-Kutta, utilizando vários valores de energia, até que a função de onda obtida seja muito próxima de uma função de quadrado integrável. Quando isto ocorre, a energia utilizada encontra-se muito próxima da autoenergia. Pode-se então calcular a diferença entre o resultado obtido numericamente e os resultados experimentais [disponíveis em (3)]. Impõe-se que estas diferenças devam ser mínimas, é possível montar um sistema de equações não-lineares. Adaptando o método de Newton para a resolução de sistema de equações não-lineares (4), pode-se encontrar os valores dos parâmetros caso os valores iniciais dos parâmetros estejam próximos o suficiente dos valores que minimizam a diferença entre as energias calculadas e detectadas.

Palavras-chave: Quarks pesados. Modelo de potenciais. Runge-Kutta.

Referências

- 1 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to elementary particles**. 2nd ed. New York:John Wiley & Sons, 2008. cap. 5.
- 2 BERNARDINI, A.; DOBRIGKEIT, C. The charmonium and bottomonium mass spectroscopy with a simple approximation of the kinetic term. **Journal of Physics G: nuclear and particle physics**, v. 29, n. 7, p. 1439–1449, 2003.
- 3 NAKAMURA, K. et al. Review of particle physics. **Journal of Physics G: nuclear and particle physics**, v. 37, n. 7A, p. 075021, 2010.
- 4 FRANCO, Neide B. F. **Cálculo numérico**. São Paulo:Pearson Education do Brasil, 2006. cap. 3.

IC-1B - Potential model for heavy quarks

SERRONE, Willian Matioli¹; MENDES, Tereza Cristina da Rocha¹

willian.matioli@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

The present work aims to study bound states of heavy quarks, specifically the bottomonium (bound state of a quark bottom and an antiquark bottom). In such systems, relativistic effects become small (1). Thus, the equation that describes the bound state (the Bethe-Salpeter equation), when imposed the approximation for the non-relativistic regime, becomes the Schrödinger equation (2). The potential to be used can be obtained by considering the approximation in which quarks interact predominantly by a single gluon exchange and adding to this potential a linear confinement term (2). This potential will have some free parameters that can be adjusted so that eigenenergies obtained by solving the Schrödinger equation coincides with the experimental results. The objective of this work is to find the parameters of the potential suggested in (2). For this, we choose initial values for these parameters, and integrates numerically the Schrödinger equation by Runge-Kutta method, using various values of energy, until the wave function obtained is very close to a square integrable function. When this occurs, the energy used is very close to eigenenergy. You can then calculate the difference between the result obtained numerically and the experimental results [available in (3)]. By requiring that these differences should be minimal, it is possible to assemble a system of nonlinear equations. Adapting Newton's method for solving system of nonlinear equations (4), one can find the parameter values if the initial values of the parameters are close enough to the values that minimize the difference between the energies calculated and detected.

Keywords: Heavy quarks. Potential models. Runge-Kutta.

References

- 1 GRIFFITHS, D. J. **Introduction to elementary particles**. 2nd ed. New York:John Wiley & Sons, 2008. cap. 5.
- 2 BERNARDINI, A.; DOBRIGKEIT, C. The charmonium and bottomonium mass spectroscopy with a simple approximation of the kinetic term. **Journal of Physics G: nuclear and particle physics**, v. 29, n. 7, p. 1439–1449, 2003.
- 3 NAKAMURA, K. et al. Review of particle physics. **Journal of Physics G: nuclear and particle physics**, v. 37, n. 7A, p. 075021, 2010.
- 4 FRANCO, Neide B. F. **Cálculo numérico**. São Paulo: Pearson Education Brasil, 2006. cap. 3.

IC-2A - Introdução à física em espaços curvos e à teoria quântica de campos

PIMENTA, Leandro Silva¹; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla¹

leandro.silva.pimenta@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Física contemporânea baseia-se sobre dois pilares: a Mecânica Quântica, com sua máxima sofisticação na Teoria Quântica de Campos (TQC), e a Relatividade Geral. A TQC é a formulação consistente da Mecânica Quântica no escopo da Relatividade Restrita. Visando obter os conhecimentos essenciais sobre as duas áreas, o autor desenvolveu estudos sobre relatividade restrita, topologia, geometria diferencial e espaços-tempos curvos. Atualmente, vem sendo desenvolvido um projeto em Análise Funcional, principalmente sobre espaços de dimensão infinita e operadores que neles atuam, com vistas à TQC. O formalismo que utiliza tais operadores é o que melhor permite a generalização dos campos quânticos para um contexto de relatividade geral, a chamada Teoria Quântica de Campos em Espaços-Tempos Curvos (TQCEC). O estudo dessa área é o objetivo último da presente iniciação científica. Paralelamente, uma abordagem menos formal da TQC vem sendo estudada.

Palavras-chave: Relatividade. Análise funcional. Mecânica quântica.

Referências

- 1 VANZELLA, D. A. T. **Introdução à física em espaços tempos curvos**. São Carlos: IFSC, s.d. Notas de aula.
- 2 RINDLER, W. **Relativity**: special, general, and cosmological. Oxford: Oxford University Press, 2006. 430 p.
- 3 HARTLE, J. B. **Gravity**: an introduction to Einstein's general relativity. San Francisco: Addison-Wesley, 2003. 582p.
- 4 WALD, R. M. **General relativity**. Chicago: University of Chicago Press, 1984. 491p.
- 5 BARATA, J. C. A. **Curso de física matemática**. Disponível em: <denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/> . Acesso em: 26 Ago. 2011.
- 6 HARRIS, E. G. **A pedestrian approach to quantum field theory**. New York: Wiley-Interscience, 1972. 167 p.

IC-2B - Introduction to physics in curved space-times and quantum field theory

PIMENTA, Leandro Silva¹; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla¹

leandro.silva.pimenta@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Contemporary Physics is based upon two pillars: Quantum Mechanics, with Quantum Field Theory (QFT) being its maximum sophistication, and General Relativity. QFT is the consistent formulation of Quantum Mechanics in a Special Relativistic context. Aiming to obtain the essential knowledge of both areas, the author developed studies about Special Relativity, topology, differential geometry and curved space-times. Currently, a project in Functional Analysis is in development, mainly about infinite-dimensional spaces and operators acting on them, intending to QFT. The formalism that uses such operators is the best one to allow a generalization of quantum fields to a general-relativistic context, the so called Quantum Field Theory in Curved Space-Time (QFTCS). The study of this topic corresponds to the final goal of this undergraduate research project. A more informal approach to QFT has been studied in parallel.

Keywords: Relativity. Functional analysis. Quantum mechanics.

References

- 1 VANZELLA, D. A. T. **Introdução à física em espaços tempos curvos.** São Carlos: IFSC, s.d. Notas de aula.
- 2 RINDLER, W. **Relativity:** special, general, and cosmological. **Oxford:** Oxford University Press, 2006. 430 p.
- 3 HARTLE, J. B. **Gravity:** an introduction to Einstein's general relativity. San Francisco: Addison-Wesley, 2003. 582p.
- 4 WALD, R. M. **General relativity.** Chicago: University of Chicago Press, 1984. 491p.
- 5 BARATA, J. C. A. **Curso de física matemática.** Disponível em: <denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/> . Acesso em: 26 Ago. 2011.
- 6 HARRIS, E. G. **A pedestrian approach to quantum field theory.** New York: Wiley-Interscience, 1972. 167 p.

IC-3A - Análise da percolação em redes Erdös-Rényi

WANDERLEY, Adilson Barros¹

adilson.wanderley@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Muitos sistemas na natureza podem ser modelados por meio de redes. Redes complexas são sistemas onde a conexão entre os elementos não obedece um padrão regular como por exemplo a estrutura das células cerebrais, a sociedade e o relacionamento entre pessoas, dentre outras¹. É possível estudar as propriedades da rede por meio de algumas ferramentas já conhecidas e utilizadas². Neste trabalho a análise da rede aleatória do tipo Erdös-Rényi é feita considerando seu maior componente em função da probabilidade observando a ocorrência de um ponto crítico. A rede é construída escolhendo a cada passo, de maneira aleatória, dois vértices e conectando-os com uma probabilidade p fixa, sendo que cada par é considerado uma única vez. Representamos esta rede por uma matriz de adjacência, onde cada elemento A_{ij} da matriz recebe 1, caso os vértices i e j estejam conectados, ou 0 caso não estejam conectados. Nossa rede não considera auto conexões, logo se $i=j$ então $A_{ii}=0$. O componente da rede, ou aglomerado, é um conjunto de vértices da rede conectados entre si direta ou indiretamente. Para gerar os dados foi desenvolvido um código em linguagem C++ fazendo-se uma classe com os métodos GeraMatriz, Grau, GrauMedio, RetornaMatriz, RetornaVizinho e VerticeLigado. A saída gerou arquivos contendo dados da simulação do maior componente em função da probabilidade de conexão. Foram coletados dados utilizando como parâmetros a dimensão da matriz $N=10$, $N=100$ e $N=1000$, com probabilidade p variando de 0 até 1 em passos de 0.05, 0.005 e 0.0005, respectivamente. A análise dos dados permitiu detectar o surgimento de um ponto crítico quando a probabilidade de conexão aumenta. Este ponto é conhecido como ponto de percolação e possui valor dependente do aumento de N . Dessa análise pudemos observar uma tendência para decaimento da probabilidade crítica quando o número de elementos na rede é elevado, o que pode ser observado por meio da expressão $p(N-1)=1$.

Palavras-chave: Percolação. Redes aleatórias. Aglomerado.

Referências

1 RODRIGUES, F. A. **Caracterização, classificação e análise de redes complexas**. 2007. 157 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

IC-4A - Homogeneidade morfológica neural: buscando outliers em categorias de células neurais

ZAWADZID, Krissia¹;

krissia.zawadzki@gmail.com

¹ IFSC - Universidade de São Paulo

Diferentes classes de neurônios podem ser distinguidas por meio de seus formatos ou morfologia. A Neuromorpho fornece um banco de dados de características morfológicas de mais de 5000 neurônios de diferentes espécies de animais e sistemas neurais. Aqui, nós apresentamos uma abordagem para classificação automática desses neurônios com protótipos para cada classe e outliers para neurônios que não possam ser facilmente atribuídos a uma classe. Com base nas medidas morfológicas fornecidas pelo banco de dados, começamos detetando outliers em todas as células do repositório. Para determinar neurônios que pudessem representar protótipos, consideramos as zonas de alta densidade de probabilidade, identificando neurônios que pertencessem a cada uma delas. Então, designamos assinaturas das variações dos valores médios das medidas ao longo das transições entre regiões, particularmente as primeiras e últimas destas. Além disso, recuperamos os formatos tanto dos protótipos quanto dos outliers por meio da reconstrução desses neurônios disponíveis na base Neuromorpho. Os resultados indicam um aumento na complexidade das formas neurais em casos de outliers, de forma que os protótipos tendem a manter uma morfologia mais simples.

Palavras-chave: Reconhecimento de padrões. Neurociência. Neuromorfometria.

Referências

- 1 ECHTERMEYER, C.; COSTA, L.F.; RODRIGUES, F.A.; KAISER, M. Automatic network fingerprint through single-node motifs. **PLoS ONE**, San Francisco, v. 6, n. 1, p. e15765, 2011.
- 2) ASCOLI, G.A.; DONOHUE, D.E.; HALAVI, M. NeuroMorpho.Org: a central resource for neuronal morphologies. **Journal of Neuroscience**, Washington, v. 27, n. 35, p. 9247-51, 2007.
- 3) COSTA, L.; ZAWADZKI, K.; MIAZAKI, M.; TARASKIN, S. Unveiling the neuromorphological space. **Frontiers in Computational Neuroscience**, Lausanne, v. 4, n. 2, p. 1-13, Dec.2010.

IC-5A - Relação temperatura-composição química de discos de acreção proto-estelares em estrelas T-Tauri

OLIVEIRA, Luma Melo de¹; PEREIRA, Vera Jatenco¹

lumadeoliveira01@yahoo.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Astronomia e Geofísica - Universidade de São Paulo

Este projeto visa estudar a evolução temporal de discos de acreção proto-estelares através da determinação da temperatura efetiva do disco e sua relação com sua composição química. O processo de formação estelar se dá dentro de nuvens moleculares (regiões de grande concentração de gás, moléculas e poeira) que precisam se contrair de um fator da ordem de 106 para formar as estrelas. Se a nuvem possuir uma pequena rotação inicial, a conservação de momento angular prevê que durante o rápido colapso essa rotação pode aumentar significativamente. Dessa forma, um disco de acreção ao redor do equador proto-estelar pode ser encontrado juntamente com um vento e jatos bipolares (1). O disco de acreção evolui até que se dissipe por completo formando um possível sistema planetário. Foi somente com Lynden-Bell & Pringle (1974) que os discos de acreção ganharam um formalismo teórico. A composição química das estrelas T-Tauri e a temperatura efetiva das mesmas são determinadas através de dados observacionais, ou seja, a partir de seu espectro. Analisando as características espectroscópicas que diferenciam os objetos de baixa massa encontramos abundância de lítio, ferro, oxigênio, sódio, cálcio, carbono e outros (2, 3). Com essa e outras informações é possível calcular a temperatura efetiva. A temperatura do disco estudada é da forma: $Td4(R) \sim T4eff / (R^*/R)^3$ sendo Td a temperatura do disco, $Teff$ a temperatura efetiva da estrela, R^* o raio da estrela e R o raio do disco. Através dessa equação podemos ter uma idéia inicial e geral para estrelas T-Tauri típicas. Com $R=2R^*$ e $Teff \sim 4.000K$ a temperatura da poeira no disco deve ser de $Td \sim 1000K$. Iremos construir um modelo detalhado da evolução do disco, contendo a temperatura (em função do raio) e sua composição química ao longo da evolução. A partir dos dados obtidos poderemos entender melhor a evolução química do disco e sua evolução como um todo.

Palavras-chave: Estrelas TTauri. Disco de acreção. Formação de estrelas.

Referências

- 1 HARTMANN, L. **Accretion processes in star formation.** Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- 2 OLIVEIRA, I. M. **Observational constraints on the evolution of dust in protoplanetary disks.** 2011. 231 p. Ph.D. Thesis. - Universiteit Leiden, Leiden, 2011.
- 3 ROJAS, G. **Abundâncias químicas em estrelas TTauri fracas.** 2003. 107 p. Dissertação (Mestrado em Astronomia) – Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2003.

IC-6A – Estudo de composição de raios cósmicos de altíssimas energias baseado na taxa de elongação medida pelo observatório Pierre Auger

PRADO, Raul Ribeiro¹; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de¹

raul.prado@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O Observatório Pierre Auger conta com 27 telescópios de fluorescência que medem o desenvolvimento longitudinal dos chuveiros atmosféricos gerados por raios cósmicos de altíssima energia. A profundidade atmosférica na qual estes chuveiros atingem o maior número de partículas é chamado de Xmax e pode ser utilizado como parâmetro para estudo de composição devido a sua sensibilidade ao tipo de partícula primária. A evolução do Xmax com a energia é denominada de taxa de elongação. A dificuldade desta análise é garantir que o telescópio tenha eficiência equivalente para eventos com diferentes características geométricas. Geralmente isso é conseguido através de cortes nos dados medidos que diminuem consideravelmente o número de eventos utilizados no estudo da taxa de elongação. Utilizando simulações de Monte Carlo dos chuveiros atmosféricos e dos telescópios de fluorescência podemos calcular a matriz de transformação entre as partículas primárias que realmente chegam à atmosfera para o número de partículas primárias que foram medidas pelo telescópio. O problema que temos que resolver então é sistema linear no qual o histograma medido é o resultado da aplicação desta matriz sobre o histograma dos dados reais. Como esta matriz possui características singulares, técnicas numéricas melhoradas devem ser utilizadas para solucionar o problema, e são geralmente chamadas de técnicas de deconvolução. Neste trabalho foram implementadas duas técnicas baseadas em (1) e (2). A primeira utiliza decomposição em SVD adicionada a métodos de suavização. A segunda é baseada em estatística bayesiana e alcança a solução através de iterações. As técnicas de deconvolução implementadas neste projeto se mostraram muito eficientes, possibilitando que a análise da taxa de elongação possa ser realizada utilizando um número muito maior de dados medidos pelo observatório.

Palavras-chave: Raios Cósmicos. Composição. Análise de dados.

Referências

1 HOCKER, A.; KARTVELISHVILI, V. SVD approach to data unfolding. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v.372,p.469-481, 1996. DOI: 10.1016/0168-9002(95)01478-0.

2 D'AGOSTINI, G. A multidimensional unfolding method based on Bayes' theorem **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, v. 362, n. 2-3, p. 487-498, 1995.

IC-7A - Propriedades em raios X de estrelas Wolf-Rayet

RIBEIRO, E. M.¹; OLIVEIRA FILHO, R. L.²

evandro.ribeiro@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Física - Universidade Federal de Sergipe

O estudo de estrelas Wolf Rayet é importante sob diferentes aspectos, como por exemplo no estabelecimento de vínculos a modelos evolutivos de estrelas “massivas”, e no entendimento de ventos estelares em condições físicas extremas e do enriquecimento químico de galáxias. Observações em raios X são cruciais para fazer avançar o nosso conhecimento sobre este tipo de objeto. Nós investigamos a distribuição espectral e a variabilidade em raios X de uma amostra de 26 estrelas WR a partir de observações realizadas pelo satélite XMM-Newton. Os resultados são confrontados com os tipos espectrais e medidas de velocidades terminal do vento disponíveis na literatura. A distribuição dos objetos em diagramas cor-cor em raios X é compatível com uma emissão térmica com $kT \sim 0,5\text{-}5$ keV. Esta tendência é quebrada por objetos em sistemas binários, cuja dureza espectral é especialmente variável e está potencialmente associada à mudanças na temperatura e medidas de emissão de plasma(s) e/ou na absorção foto-elétrica intrínseca. Não foram observadas diferenças significativas entre a emissão X de estrelas WC e WN da amostra.

Palavras-chave: Wolf-Rayet. Astrofísica. Raios-x.

Referências

- 1 CROWTHER, P. A. Physical properties of Wolf-Rayet stars. **Annual Review of Astronomy & Astrophysics**, v.45, n.1, p.177-219, 2007. DOI: 10.1146/annurev.astro.45.051806.110615.
- 2 HUCHT, K. A. The VIIth catalogue of galactic Wolf-Rayet stars. **New Astronomy Reviews**, v. 45, n.3, p.135-232, 2011.
- 3 XMM-Newton. Survey Science Centre Consortium. 2010. Disponível em: <<http://xmmssc-www.star.le.ac.uk/>>. Acesso em: set.2011..

IC-8A - Desenvolvimento da óptica de telescópios para experimentos de astrofísica de partículas

DIPOLD, Jessica¹; SOUZA FILHO, Luiz Vitor de²

jessica.dipold@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A emissão de raios gama é um dos eventos mais energéticos do universo. A fontes destas partículas podem ser explosões de supernovas, pulsares, surtos de raios gama (gamma ray bursts) entre outras. O estudo dessas fontes através da detecção de luz Cherenkov por telescópios terrestres é uma técnica bem estabelecido. Três principais experimentos encontram-se em funcionamento: VERITAS, HESS e MAGIC. Ao entrar na atmosfera os raios gamas interagem com os núcleos de ar da atmosfera produzindo em efeito cascata chamado de chuveiro atmosférico. Os experimentos de luz Cherenkov têm capacidade de reconstruir a forma desses chuveiros, podendo obter três informações fundamentais sobre essas partículas: sua energia, direção de chegada e identidade. Para possibilitar um aumento de sensibilidade e do alcance energético em relação aos experimentos atuais de raios gama, foi proposta a criação do CTA (Cherenkov Telescope Array), um arranjo de centenas de telescópios Cherenkov para medição de raios gama com energias entre 10GeV e 100TeV. Atualmente o CTA está em fase de projeto com previsão para o início da construção em 2014. O CTA é um projeto internacional com participação de várias instituições brasileiras incluindo o Instituto de Física de São Carlos. Este trabalho está inserido nos esforços de construção de espelhos para o CTA. Diversas técnicas de fabricação dos substratos, aluminização e recobrimento dos espelhos estão sendo testadas. Em colaboração com o grupo da Comissão de Energia Atômica em Saclay, França e com a empresa Opto Eletrônica, o objetivo deste projeto é desenvolver espelhos com a qualidade e custo apropriados para o CTA. Neste trabalho apresentaremos medidas de raios de curvatura e refletividade de protótipos realizados em São Carlos.

Palavras-chave: Astronomia Gama. Telescópios Cherenkov. Espelhos.

Referências

1 CORNILS, R. et al. The optical system of the H.E.S.S. imaging atmospheric Cherenkov telescopes: layout and components of the system. **Astroparticle Physics**, v. 20, n. 2, p. 111-128, Nov. 2003. DOI: 10.1016/S0927-6505(03)00171-3.

IC-9A - Franjas de Ramsey em um relógio atômico compacto

SMAIRA, A. F.¹; MÜLLER, S. T.¹; BAGNATO, S. V.¹; MAGALHÃES, D. V.⁴

andre_smaira@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo

O ciclo de funcionamento de um relógio atômico compacto tem quatro etapas de funcionamento (resfriamento e aprisionamento, preparação, interrogação e detecção dos átomos). Nesse trabalho, serão explicados, superficialmente, os métodos de interrogação de Rabi e de Ramsey. Dessa forma poderemos analisar Franjas de Ramsey obtidas para os resfriamentos Doppler e Sub-Doppler, destacando e explicando suas diferenças.

Palavras-chave: Física atômica. Átomos frios. Relógio atômico.

Referências

- 1 MÜLLER, S. T. **Padrão de frequência compacto.** 2010. 124 p. Tese (Doutorado em Ciências - opção: Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 2 MAGALHAES, D. V. **Construção de uma fountain atômica para utilização como padrão primário de tempo.** 2004. 124 p. Tese (Doutorado em Ciências - opção: Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.
- 3 RABI, I. I.; ZACHARIAS, J. R.; MILLMAN, S.; KUSCH, P. A new method of measuring nuclear magnetic moment. **Physical Review**, v. 53, n. 4, p. 318, 1938.
- 4 RAMSEY, N. F. A molecular beam resonance method with separated oscillating fields. **Physical Review**, v. 78, n. 6, p. 695-699, 1950.
- 5 BAGNATO, V. S. ; ZILIO, S. C. Recuo de Um átomo devido à absorção de fótons. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 10, p. 43-49, dez. 1988.
- 6 VANIER, J.; AUDOIN, C. **The quantum physics of atomic frequency standards.** Bristol: Adam Hilger, 1989, v.2
- 7 FIRMINO, M. E. ; CLUSSI, V. C. ; ZILIO, S. C. ; BAGNATO, V. S. Projeto, construção e teste de Um sistema experimental para desacelerar átomos neutros. **Revista de Física Aplicada e Instrumentação**, v. 4, n. 4, p. 368-388, 1989.
- 8 MAGNETO Optic Trap. Disponível em: <<http://jrm.phys.ksu.edu/mot.html>>. Acesso em: 11/08/2011.

IC-9B - Ramsey fringes in a compact atomic clock

SMAIRA, A. F.¹; MÜLLER, S. T.¹; BAGNATO, S. V.¹; MAGALHÃES, D. V.⁴
andre_smaira@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo

The duty cycle of an compact atomic clock has four stages of operation ("cooling and trapping", "preparation", "interrogation" and "detection of atoms"). In this paper, we explain, superficially, the methods of interrogation of Rabi and Ramsey. Thus, we can analyze the Ramsey fringes obtained for the Doppler cooling and Sub-Doppler cooling, highlighting and explaining their differences.

Keywords: Atomic physics. Cold atoms. Atomic clock.

Referências

- 1 MÜLLER, S. T. **Padrão de frequência compacto.** 2010. 124 p. Tese (Doutorado em Ciências - opção: Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 2 MAGALHAES, D. V. **Construção de uma fountain atômica para utilização como padrão primário de tempo.** 2004. 124 p. Tese (Doutorado em Ciências - opção: Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.
- 3 RABI, I. I.; ZACHARIAS, J. R.; MILLMAN, S.; KUSCH, P. A new method of measuring nuclear magnetic moment. **Physical Review**, v. 53, n. 4, p. 318, 1938.
- 4 RAMSEY, N. F. A molecular beam resonance method with separated oscillating fields. **Physical Review**, v. 78, n. 6, p. 695-699, 1950.
- 5 BAGNATO, V. S. ; ZILIO, S. C. Recuo de Um átomo devido à absorção de fótons. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 10, p. 43-49, dez.1988.
- 6 VANIER, J.; AUDOIN, C. **The quantum physics of atomic frequency standards.** Bristol: Adam Hilger, 1989. v.2.
- 7 FIRMINO, M. E. ; CLUSSI, V. C. ; ZILIO, S. C. ; BAGNATO, V. S. Projeto, construção e teste de Um sistema experimental para desacelerar átomos neutros. **Revista de Física Aplicada e Instrumentação**, v. 4, n. 4, p. 368-388, 1989.
- 8 MAGNETO Optic Trap. Disponível em: <<http://jrm.phys.ksu.edu/mot.html>>. Acesso em: 11/08/2011.

IC-10A - Dispositivo orgânico com multiplas camadas: estudo da dinâmica dos excitons e da transferência de cargas

DO VALE, Mike M.¹; CATANDI, Patrícia Bongiovanni¹; FARIA, Roberto Mendonça³ ; Francisco Eduardo Gontijo Guimarães⁴
patriciabcataudi@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Construção de um dispositivo com múltiplos poços quânticos, MQW (multiple quantum well), para o estudo do comportamento do exciton em seu interior. Exciton é uma quase-partícula neutra que representa o estado ligado entre um elétron e um buraco ao serem atraídos pela força de Coulomb em um material isolante ou semicondutor. Visando-se a construção de poços quânticos nanométricos com o uso de materiais poliméricos de gaps diferentes foi utilizada uma variação da técnica de deposição de filmes finos spin-assisted layer-by-layer (SP-LbL) na estruturação dos filmes automontados. Para a barreira de potencial foi selecionado o Poly(9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl) (PFO) cujo gap entre as bandas HOMO e LUMO é de aproximadamente 3,2 eV. Através da conversão do polieletólito poly(xylylidene tetrahydrothiophenium chloride) (PTHT) e do dodecylbenzenesulfonate ion (DBS) (1) em vácuo à 150°C obtivemos o polímero condutor poly(p-phenylene vinylene) (PPV) que possui um gap de aproximadamente 2,5 eV, e por possuir um menor gap de energia em comparação ao PFO este foi escolhido como poço quântico na estrutura. A deposição dos filmes se deu à 3000 rpm por um minuto com um filme de PFO seguido de duas bicamadas do tipo (PTHT+DBS) e por fim conversão desses a PPV. A figura 1 ilustra a disposição dos poços quânticos na amostra. Para o estudo dessas estruturas utilizamos medidas de absorção, fluorescência e emissão dos materiais. Para um aprofundamento dos nossos conhecimentos realizamos uma medida de difração de raio-X em uma amostra contendo 25 poços para analisar sua uniformidade. Nessas medidas observamos a transferência de elétrons π^+ do PFO para o PPV. Essa transferência de cargas é analisada através da supressão das intensidades do PFO e consequente elevação das do PPV.

Palavras-chave: PFO. PPV. MQW.

Referências

- FAVARIN, H.R.; SPADACIO, D.; FACETO, A.D. ; ZUCOLOTTO, V. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; GUIMARÃES, F. E. G. Energy modulated heterostructures for directional energy transfer and carrier confinement based on conjugated polymers **Advanced Functional Materials**, v. 17, p.28620-2868, 2007.

IC-11A - Caracterização magnética e elétrica de ligas antiferromagnéticas de Cr-Mn

DALLA-COSTA, Leonardo J.¹

leonardodallacosta@yahoo.com.br

Departamento de Física - Universidade Federal de São Carlos

O Cromo e suas ligas com pequenas concentrações de impureza apresentam um comportamento antiferromagnético descrito por ondas de densidade de spin (spin-density waves). A introdução de elementos a esquerda do Cromo na tabela periódica diminuem a temperatura de Néel, como é o caso das ligas com V e Ti. Por outro lado, ao se introduzir elementos a direita do Cromo na tabela periódica a temperatura de Néel aumenta, por exemplo, nas ligas com Mn e Fe. No caso particular da introdução Mn uma nova fase magnética é observada, denominada de “spin glass”, como foi reportado anteriormente por Galkin et al. (1). Neste trabalho estudamos as propriedades magnéticas e elétricas das ligas de Cromo-Manganês (Cr-Mn) com concentrações entre 0 e 5 at. % de Mn, com objetivo de determinar as suas transições de fase, em particular a fase “spin glass”. As amostras foram preparadas por meio de fusão dos grânulos em um forno a arco voltaico. Foram realizadas medidas de magnetização, resistividade elétrica, (em função da temperatura e do campo magnético), e de densidade. Os resultados mostram que a T_c (temperatura crítica, para observarmos o comportamento “spin glass”) aumenta conforme adicionamos Mn no Cr na taxa de 23,55K/at% de Mn, e na medida que o campo magnético aumenta temperatura para que a magnetização se torne constante (o que indica o começo do comportamento “spin glass”) também aumenta, e as medidas elétricas ainda estão em progresso.

Palavras-chave: Cromo. Spinglass. Magnetismo.

Referências

1 GALKIN, V. Y. et al. A new type of spin-glass in spin-density-wave CrMn and CrSiMn alloys. **Journal of Physics: Condensed Matter**, Bristol, v. 7, n. 47, p. L649-L655, Nov. 1995. [DOI: 10.1088/0953-8984/7/47/003](https://doi.org/10.1088/0953-8984/7/47/003).

IC-12A – Estrutura atômica de nanoalloys de Pt-Ni: um estudo pelo método de Basin Hopping Monte Carlo Atomic

LOPES, Victor F. P.¹; RONDINA, Gustavo G.¹; PIOTROWSKI, Mauricio J.¹; DA SILVA, Juarez L. F.¹

victor.ferrari.lopes@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A possibilidade de controlar a reatividade de nanopartículas (NPs) de metais de transição (MT) por ajustes em seu tamanho, formato e superfície nos fornece a possibilidade de desenvolver novos aparelhos catalisadores com um amplo espectro de aplicação. O conhecimento da estrutura atômica de pequenas NPs (núcleo e superfície) é portanto fundamental para que possamos aprimorar nosso entendimento sobre suas atividades catalíticas. Nesse contexto, este estudo tem o objetivo de estudar a evolução do tamanho e da forma de nanopartículas e nanoalloys de Pt, Ni e híbridos Pt-Ni. Este estudo usará o algoritmo chamado Basin Hopping Monte Carlo (BHMC) (1) implementado em nosso programa de otimização global. Devido ao custo computacional de cálculos de primeiros princípios baseados na Teoria do Funcional da Densidade (TFD), as interações entre os átomos serão descritas por potenciais interatônicos de pares, como o potencial de Sutton-Chen (SC) (2). Um amplo número de simulações via BHMC foram feitos para NPs de Pt e Ni, de forma que as estruturas de menores energias foram identificadas para um número de partículas de 1 a 147. Em seguida, mais simulações foram feitas para nanoalloys de Pt-Ni e, dentre outras coisas, foi identificado que, para certas composições, o níquel tem uma forte preferência de estar localizado junto às partículas do núcleo. Conforme o número de átomos de Ni aumenta, entretanto, o Ni também tende a se localizar na superfície. Além disso, a entalpia de formação foi calculada como uma função da composição Pt-Ni e um mínimo bem definido foi identificado, o que ajuda a explicar alguns resultados encontrados na literatura (3,4). Nossos resultados fornecem uma imagem simples e clara para explicar alguns resultados da literatura, tendo em vista a localização de átomos de Ni para certas composições de Ni e alguns sistemas de Ni-Pt.

Palavras-chave: Basin Hopping Monte Carlo. Potencial de Sutton-Chen. Nanoalloys. Nanopartículas de platina e níquel.

Referências

- 1 WALES, D. J.; DOYE, J. P. K. Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of lennard-jones clusters containing up to 110 atoms. **Journal Physical Chemistry A**, v.101, np.5111-5117, 1997.
- 2 SUTTON, A. P. ;CHEN, J. Long-range finnis Sinclair potentials. **Philosophical Magazine Letters**, v.61, n.3, p.139 -146, 1990.
- 3 CHEN,Y. et al. Prediction of chemical anisotropy on sidewall of boron nitride nanotubes: a new application of directional curvature theory **Journal Physical Chemistry C**, v. 12 , n.48, p.18792,2008.
- 4 MANDAL, M. et al.. Synthesis and characterization of superparamagnetic Ni-Pt nanoalloy. **Chemistry Materials**, v.15,n. 19, p.3710-15,2003.

IC-12B – Atomic structure of Pt-Ni nanoalloys: a Basin-Hopping Monte Carlo study

LOPES, Victor F. P.¹; RONDINA, Gustavo G.¹; PIOTROWSKI, Mauricio J.¹; DA SILVA, Juarez L. F.¹

victor.ferrari.lopes@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

The possibility of controlling the reactivity of transition-metal (TM) nanoparticles (NP) by tuning their size, shape and surface termination provides the possibility of designing new catalyst devices for a wide range of technological applications. The knowledge of the atomic structure of small NPs (core and surface) is therefore fundamental to improve our understanding of their catalytic activity. In this context, this study aims to study the size evolution and shape of Pt and Ni NPs and Pt-Ni nanoalloys. This study will employ the Basin Hopping Monte Carlo (BHMC) algorithm (1) as implemented in our own global optimization package. Due to the computational cost of first-principles calculations based on the density functional theory (DFT), the interaction between the atoms will be described by interatomic pair-potentials such as the Sutton-Chen (SC) Potential (2). A large number of BHMC simulations were initially performed for Pt and Ni NPs and ground-state structures were identified for $N = 1\text{?}147$. Further BHMC simulations were then made for Pt-Ni nanoalloys and a few trends were identified, namely, Ni has a strong preference to be located within the core particles for particular compositions, however, as the number of Ni atoms increases, Ni tends to get arranged on the surface as well. Furthermore, the heat of formation was calculated as a function of the composition for Pt-Ni, and a well defined minimum was identified, which helps to explain experimental trends reported in the literature (3,4). Our results provide a clear and simple picture to explain experimental results reported in the literature concerning the location of the Ni atoms for particular compositions of Ni and Ni-Pt systems.

Keywords: Basin Hopping Monte Carlo. Sutton Chen Potential. Nanoalloys. Pt-Ni nanoparticles.

Referências

1 WALES, D. J.; DOYE, J. P. K. Global optimization by basin-hopping and the lowest energy structures of lennard-jones clusters containing up to 110 atoms. **Journal Physical Chemistry A**, v.101, np.5111-5117, 1997.

2 SUTTON, A. P. ;CHEN, J. Long-range finnis Sinclair potentials. **Philosophical Magazine Letters**, v.61, n.3, p.139 -146, 1990.

3 CHEN,Y. et al. Prediction of chemical anisotropy on sidewall of boron nitride nanotubes: a new application of directional curvature theory **Journal Physical Chemistry C**, v. 12 , n.48, p.18792,2008.

4 MANDAL, M. et al.. Synthesis and characterization of superparamagnetic Ni-Pt nanoalloy. **Chemistry Materials**, v.15,n. 19, p.3710-15,2003.

IC-13A – O uso da relação de Scherrer na determinação dos tamanhos dos cristalitos em amostras de carbono grafite micronizadas

SILVA, Geisiane Rosa da¹; SANCHES, Edgar Aparecido¹; MASCARENHAS, Yvonne Primerano¹
geisiane.silva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O grafite é uma das formas alotrópicas do carbono, tal como o diamante. O grafite pode ser classificado como natural ou sintético, apresentando a mesma estrutura cristalina, porém com tamanhos de cristalitos variados e diferentes propriedades físicas e químicas. Essas características tornam o grafite um material com grande potencial para aplicações (1). Foram utilizadas três amostras de carbono grafite, identificadas como C1, C2 e C3, as quais foram micronizadas para a obtenção de diferentes tamanhos de cristalitos e estudadas por difração de raios X (DRX) pelo método do pó. Os dados de DRX foram obtidos no Laboratório de Raios X do Grupo de Cristalografia do IFSC, utilizando-se o equipamento Rigaku Rotaflex equipado com monocromador de grafite e ânodo rotatório, operando com CuK α , 50kV e 100mA. Os difratogramas foram obtidos em modo contínuo, $2\theta = 5 - 60^\circ$ com passo de 0.02° e 5 segundos/passo. Os tamanhos dos cristalitos (T) foram determinados através da relação de Scherrer (2) ($T = K\lambda/B\cos\theta$), onde K é o fator de forma para a média dos cristalitos (~0.9) e B é a largura a meia altura do maior pico cristalino em radianos. O processo de Micronização proporcionou o controle dos tamanhos dos cristalitos, de acordo com o interesse na aplicação da amostra. Foram obtidos para as amostras C1, C2 e C3 os tamanhos médios dos cristalitos de, respectivamente, 245.3, 19.5 e 4.2 \AA , mostrando que o processo é eficiente e resulta na diminuição dos tamanhos dos cristalitos.

Palavras-chave: Cristalografia. Difração de raios X. Relação de Scherrer.

Referências:

- 1 KENAN, W. Why grafite. **Ceramic Engineering & Sciience Proceedings**, v. 16, n. 1, p. 178-180, 1995.
- 2 KENNEDY, C.J., LERBER, K.V., WEISS, T. Measuring crystallinity of laser-cleaned silk by x-ray diffraction. **e-Preservation Science**, v. 2, p. 31-37, 2005.

IC-14A - Resposta de peixes elétricos de campo fraco à diferentes estímulos

GUARIENTO, Rafael Tuma¹

rafael.tuma.guariento@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Em estudo eletrofisiológicos, há diversos modelos que têm sido usados para o estudo de redes neurais biológicas. Em particular, o sinal emitido por peixes elétricos de campo fraco tem sido um importante modelo para esta finalidade nos últimos anos (1, 2). Estes peixes utilizam um campo elétrico emitido por eles próprios como forma de se localizar no espaço e de se comunicar com outros peixes. Estes sentidos são conhecidos como eletrolocalização e eletrocomunicação. Neste trabalho apresentamos uma análise estatística sobre a resposta observada no sinal elétrico do peixe de acordo com diferentes estímulos. Os experimentos são realizados com o peixe no interior de um aquário envolvido em uma gaiola de Faraday e isolado de ruídos por espumas e cabos de aço. Este aquário possui um eletrodo em cada um de seus vértices para adquirir o sinal do peixe, e um par de eletrodos mergulhados no centro para gerar estímulos. O protocolo apresentado neste trabalho é dividido em 5 partes. Na primeira, o sinal elétrico do peixe é medido logo após a colocação deste no aquário por 30 minutos, então é gerado um estímulo aleatório de 30 minutos, após este o peixe é gravado por mais 30 minutos sem estímulo, é gerado um estímulo realista por mais 30 minutos e então o peixe é finalmente gravado por mais 30 minutos. Os dados são tratados com diversas ferramentas estatísticas.

Palavras-chave: Peixes elétricos. Eletrocomunicação. Teoria da informação.

Referências

1 FORLIM, C.G. **Estudo experimental da eletrocomunicação em peixes de campo elétrico fraco da espécie Gymnotus carapo** : uma aplicação da teoria da informação. 2008. 38 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, 2008.

2 BULLOCK, H. The Future of research on electroreception and electrocommunication **Journal of Experimental Biology**, v.202, p.1455-1458, 1999.

IC-15A - Buscando medidas de dinâmica de estados excitados ultrarrápida: instrumentação de uma espectroscopia pump-probe

RIMOLI, Caio Vaz¹; FALEIROS, Marcelo Meira¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

caiov@uol.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Atualmente há um rápido progresso de pesquisas envolvendo novos materiais orgânicos para aplicações em OLEDs, células solares, fotopolimerização, fotossensibilizadores (terapia fotodinâmica), etc. A otimização de dispositivos optoeletrônicos orgânicos requer o desenvolvimento de pesquisa básica em fotofísica e fotoquímica. Logo, a obtenção de medidas de dinâmica de processos ópticos na escala de tempo que varre desde dezenas de femtossegundos(fs) a alguns nanossegundos(ns) mostra-se de fundamental importância. Experimentos de espectroscopia ultra-rápida são capazes de fazer tais investigações – por exemplo, medir a taxa de transferência de carga e de energia (éxcitons) em polímeros conjugados. Na técnica de espectroscopia de bombeio-e-prova¹, a amostra é inicialmente excitada por um pulso de luz intenso (bombeio). Após um atraso ajustável, dois outros pulsos investigam a amostra: um incidindo sobre a região excitada (prova) e o outro como referência. É medida, então, a transmitância diferencial (a diferença entre as transmitâncias da amostra excitada e não excitada) cujo valor é proporcional à densidade de excitações no material. Descreveremos um projeto que está em fase final da montagem de uma estação experimental automatizada de espectroscopia de bombeio-e-prova. Os componentes ópticos já estão montados, o software de aquisição e análise já está funcionando, faltando apenas otimizar os circuitos de pré-condicionamento e testar a sua performance. Tal montagem será importante, por exemplo, para a caracterização de processos fotofísicos em materiais orgânicos (luminescentes ou não) e para o estudo de fenômenos fotobioquímicos como fotossíntese e bioluminescência.

Palavras-chave: Espectroscopia. Bombeio-e-prova. Fotofísica.

Referências

- 1 LANZANI, G. et al. Photophysics of conjugated polymers: the contribution of ultrafast spectroscopy **Physica Status Solidi (a)**, v. 201, n. 6, p. 1116-1131, 2004.

IC-15B - Searching for ultrafast excited state dynamics measurements: a pump-probe spectroscopy instrumentation

RIMOLI, Caio Vaz¹; FALEIROS, Marcelo Meira¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

caiov@uol.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Currently there is a rapid progress of research on new organic materials for applications in OLEDs, solar cells, photopolymerization, photosensitizers (photodynamic therapy), etc. In order to optimize organic optoelectronics devices, basic research on their organic photophysics and photochemistry is required. Therefore, obtaining measurements of the dynamics of optical processes in the time scale ranging from a few femtoseconds (fs) to a few nanoseconds (ns) is of fundamental importance. Ultrafast spectroscopy pump-probe experiments¹ are able to investigate charge or energy (excitons) transfer rate in conjugated polymers. In this technique, the sample is excited from an intense pulse (pump). After an adjustable delay, other two pulses arrive on the sample to investigate it: one focused on the excited region (probe) and another being a reference pulse. From that, it's measured the differential transmittance (the difference between the excited sample and the not excited sample) whose value is proportional to the excitation density of the material. We will describe the implementation of an automated pump-probe experimental station, which is in the final stage of assembly. The optical components are already in place, the data acquisition and analysis softwares are operational and we just need to optimize the preconditioning circuits and test its performance. This experimental setup will be important, for example, to characterize photophysical processes of organic materials (luminescent or not) and to study photobiochemical processes like photosynthesis and bioluminescence.

Keywords: Spectroscopy. Pump-probe. Photophysics.

References

- 1 LANZANI, G. et al. Photophysics of conjugated polymers: the contribution of ultrafast spectroscopy **Physica Status Solidi (a)**, v. 201, n. 6, p. 1116-1131, 2004.

IC-16A - Biossensores para nanodiagnóstico: detecção por uréase

FAIS, Letícia¹; ZUCOLOTTO, V.¹

leticia.fais@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nanobiotecnologia é um termo recorrente em discussões sobre a qualidade de vida no futuro. O motivo é o avanço proporcionado pela sinergia de diferentes áreas do conhecimento - como biofísica, físico-química e medicina. A uréia - CO(NH₂)₂ - é uma molécula presente em muitos sistemas e hidrolisável na presença da enzima urease (1). O monitoramento de sua concentração é fundamental no controle do pH do solo, de atividades bacterianas (2) e funções renais, portanto, na vida animal e vegetal. Em biosensoriamento, a nanotecnologia introduziu novos meios de detecção e quantificação de moléculas de relevância biológica, comumente encontradas em concentrações muito baixas. A viabilidade de um sensor baseado na bioespecificidade da urease pela uréia já foi mostrada (4). Entretanto, é crucial melhorar a técnica tanto para obtenção de maior sensibilidade quanto versatilidade da arquitetura. Neste trabalho, desenvolvemos um sensor com complexos de nanopartículas de ouro com enzimas, comparado a um sistema com as mesmas nanopartículas apenas intercaladas com a enzima. Os sensores de bicamadas de [poli(cloreto de dialildimetilâmônio)/complexo de urease com nanopartículas de ouro] em eletrodo revestido por ITO e de bicamadas de [nanopartículas de ouro/urease] também em eletrodo revestido por ITO foram submetidos a testes eletroquímicos e de voltametria. A variação na corrente detectada e no potencial demonstrou a capacidade de os sistemas quantificarem a ureia em solução e o sensor contendo o complexo mostrou-se mais sensível a variações de concentração mais baixas - μmol/litro. Portanto, a complexação de nanopartículas com macromoléculas é muito relevante no desenvolvimento de tecnologias de sensoriamento, principalmente na área de nanodiagnósticos (5).

Palavras-chave: Biosensor. Urease. Nanotecnologia.

Referências

- 1 KIRKEGAARD, L. H. **Fertilizer composition for 3-level plant nutrition and for Insitu biosynthesis of slow-release nourishment.** Disponível em: <<http://appft1.uspto.gov/netacgi/nph-Parser?Sect1=PTO1&Sect2=HITOFF&d=PG01&p=1&u=%2Fnetahhtml%2FPTO%2Fsrchnum.html&r=1&f=G&l=50&s1=20040200>> Acesso em: 24 agosto 2011.
- 2 DELGADO, J. S. et al Has H. pylori prevalence in bleeding peptic ulcer been underestimated? a meta-regression. **American Journal of Gastroenterology**, v. 106, n. 3, p. 398-405, 2011. DOI: 10.1038/ajg.2011.2.
- 3 ZUCOLOTTO, V. **Bionano tecnologia contra a aftosa** Disponível em:<<http://www.agencia.fapesp.br/11197>>. Acesso em: 26 Agosto 2011.
- 4 CRESPILO, F. N. et al Enzyme immobilization on Ag nanoparticles/polyaniline nanocomposites. **biosens. Biosensors & Bioelectronics**, v. 24, n.10, p. 3073-3077, 2009.
- 5 JAIN, K. K. Nanotechnology in clinical laboratory diagnostics **Clinica Chimica Acta**, v. 358, n. 1, p. 37-54, 2005.

IC-16B - Biosensors for nanodyagnostics: urease detection

FAIS, Letícia¹; ZUCOLOTTO, V.¹

leticia.fais@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nanobiotechnology has become a frequent term in discussions about the future of life quality. One reason is the advances coming from the synergy between different fields of knowledge, such as biophysics, physical chemistry and medicine. Urea -CO(NH₂)₂- is a molecule hydrolysable in presence of the enzyme urease (1). Its concentration is fundamental on control of soil pH, bacterial activity (2) and renal function, consequently, animal and vegetable lives. On development of biosensors, nanotechnology has provided novel pathways to detect and quantify very low concentrations of molecules of biological relevance. The viability of a sensor containing urease as biospecific urea detector has already been shown (4). However, it is crucial to improve the technique for both obtaining higher sensibility and achieving more versatile architectures. In this study we developed a urea sensor using a nanoparticle/enzyme complex. Once the first sensor of [poly(diallyl dimethyl ammonium chloride)/enzyme with gold nanoparticle complex] bilayers on ITO electrode and the second of [gold nanoparticles/urease] bilayers on ITO electrode were built, they were submitted to different concentrations of urea on electrochemical and voltammetry detection. The variance on current and potential showed capability of both systems in quantifying urea, and the sensor with the complex showed higher sensitivity for low concentrations – μmol/liter. Therefore, complexation of nanoparticles with macromolecules may represent a novel and efficient strategy in sensory technology, mainly in nanodiagnosis (5).

Keywords: Biosensor. Urease. Nanotecnologia.

References

- 1 KIRKEGAARD, L. H. **Fertilizer composition for 3-level plant nutrition and for Insitu biosynthesis of slow-release nourishment.** Disponível em: <<http://appft1.uspto.gov/netacgi/nph-Parser?Sect1=PTO1&Sect2=HITOFF&d=PG01&p=1&u=%2Fnetahmt%2FPTO%2Fsrchnum.htm&l=r=1&f=G&l=50&s1=20040200>>. Acesso em: 24 agosto 2011.
- 2 DELGADO, J. S. et al Has H. pylori prevalence in bleeding peptic ulcer been underestimated? a meta-regression. **American Journal of Gastroenterology**, v. 106, n. 3, p. 398-405, 2011. DOI: 10.1038/ajg.2011.2.
- 3 ZUCOLOTTO, V. **Bionano tecnologia contra a aftosa.** Disponível em:<<http://www.agencia.fapesp.br/11197>>. Acesso em: 26 Agosto 2011.
- 4 CRESPILOHO, F. N. et al Enzyme immobilization on Ag nanoparticles/polyaniline nanocomposites. biosens. **Biosensors & Bioelectronics**, v. 24, n.10, p. 3073-3077, 2009.
- 5 JAIN, K. K. Nanotechnology in clinical laboratory diagnostics **Clinica Chimica Acta**, v. 358, n. 1, p. 37-54, 2005.

IC-17A - Sensores biomiméticos nanoestruturados para detecção de compostos fenólicos

BRAZACA, L. C.¹; FERNANDES, E. G. R.¹; RODRÍGUEZ-MÉNDEZ, M. L.²; SAJA, J. A.³;
ZUCOLOTTO, V.¹

lais.brazaca@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Escuela de Ingenierías Industriales - University of Valladolid

³ Faculty of Science - University of Valladolid

Dentre as técnicas analíticas, a utilização de biossensores tem sido cada vez mais frequente. Em especial, dispositivos biossensores eletroquímicos são os de maior interesse por serem: rápidos, práticos e relativamente baratos. Uma nova abordagem tem sido a troca do material biológico por moléculas orgânicas, com algum poder catalítico, capaz de mimetizar a ação de algumas proteínas. Este estudo descreve o desenvolvimento de sensores eletroquímicos baseados em filmes automontados LbL de bisftalocianina de lutécio (LuPc2) e hidrocloreto de polialilamina (PAH). Os filmes foram usados como eletrodos modificados para a quantificação de catecol e pirogalol (como representantes de compostos fenólicos). Medidas eletroquímicas foram empregadas para investigar as propriedades catalíticas da LuPc2 imobilizada em filmes automontados. Por cronoamperometria, os sensores apresentaram boa sensibilidade ($20 \text{ nA} \cdot \mu\text{M}^{-1}$) em uma ampla faixa linear ($R^2 = 0,994$) até $900 \mu\text{M}$ e limite de detecção (LD) ($s/n = 3$) de $37,5 \times 10^{-8} \text{ M}$ de catecol. Os sensores têm boa reprodutibilidade e podem ser reutilizados por ao menos dez vezes. O potencial de trabalho é de +0,3 V vs eletrodo de calomelano saturado (SCE). Em medidas de voltametria, a curva de calibração mostra uma boa linearidade ($R^2 = 0,992$) na faixa de até $500 \mu\text{m}$ com uma sensibilidade de $90 \text{ nA} \cdot \mu\text{M}^{-1}$ e LD de $8 \mu\text{M}$.

Palavras-chave: Biosensor. Enzimas artificiais. Filmes nanoestruturados.

Referências

- 1 APETREI, C.; ALESSIO, P.; CONSTANTINO, C. J. L.; DE SAJA, J. A.; RODRÍGUEZ-MÉNDEZ, M. L.; PAVINATTO, F. J.; FERNANDES, E. G. R.; ZUCOLOTTO, V.; OLIVERIRA JUNIOR, O. N. Biomimetic biosensor based on lipidic layers containing tyrosinase and lutetium bisphthalocyanine for the detection of antioxidants. **Biosensors and Bioelectronics**, v.26, n.5, p.2513-2519, 2011.
- 2 FERNANDES, E.G.R.,BRAZACA, L.C.,RODRÍGUEZ -MÉNDEZ, M.L.,DE SAJA, J.A., ZUCOLOTTO, V. Immobilization of lutetium bisphthalocyanine in nanostructured biomimetic sensors using the LbL technique for phenol detection **Biosensors and Bioelectronics**, v.26, n.12, p.4715-4719, 2011.

IC-18A - Medidas de distâncias inter-resíduos utilizando ressonância paramagnética eletrônica em regime pulsado

MENDES, Luis Felipe Santos¹; LIMA, José Fernando¹; COSTA FILHO, Antônio José da¹
luis.felipe.mendes@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O conhecimento molecular de estruturas protéicas constitui um dos ramos de maior avanço científico nas últimas décadas. Técnicas experimentais tais como a difração de raio X, microscopia eletrônica e ressonância magnética nuclear são ainda as técnicas mais poderosas de elucidação estrutural. Porém, ainda hoje, saber como essas estruturas se comportam no tempo continua sendo alvo de pouco estudo, mas de grande interesse. Dentre as diversas técnicas possíveis para estudo de dinâmica de sistemas protéicos, uma aparece com destaque nos últimos anos: as técnicas de ressonância paramagnética eletrônica (RPE). O maior limitante da técnica, que exige centros paramagnéticos em um mundo biológico onde diamagnetismo é o mais abundante, é contornado graças à técnica de marcação de spin sítio-dirigida. No projeto foi proposto um estudo inicial de dinâmica de sistemas poliméricos e na proteína humana ligante de cálcio S100A12. Para tal estudo foi utilizada a técnica PELDOR (Pulsed Electron Double Resonance) de RPE pulsada, também conhecida como Double Electron-Electron Resonance (DEER). A técnica consiste na excitação seletiva de spins em ressonância com a região de médio e alto campo do espectro de RPE de um radical nitróxido e monitoramento de um grupo acoplado via interação dipolar em ressonância com a região de baixo campo. Com a sequência de pulsos é possível refocalizar todas as interações estáticas, a menos daquela devida ao acoplamento dipolar. O espectro resultante nos fornece o padrão de Pake obtido via transformada de Fourier. Do padrão de Pake é possível obter informações sobre a distância relativa entre os marcadores nitróxido inseridos seletivamente ao longo da estrutura. Obtido os vínculos de movimento é possível construir um modelo de comportamento da estrutura em sua evolução temporal. Os resultados preliminares nos fornecem os padrões desejados e constituem os primeiros passos de uma técnica ainda em desenvolvimento, mas de sensibilidade que reside na faixa de nanômetros.

Palavras-chave: S100a12 humana. RPE pulsado. SDSL.

Referências

- 1 JESCHKE, G.; POLYHACH, J. Distance measurements on spin-labelled biomacromolecules by pulsed electron paramagnetic resonance **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 9, n.16,p.1895–1910,2007.

IC-19A - Estudos em RMN de alta pressão da proteína tioredoxina de *Plasmodium falciparum*

AZEVEDO, Érika Chang de¹; MUNTE, Claudia Elisabeth¹; KALBITZER, Hans Robert²
erika.chang.azevedo@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

²Institute for Biophysics and Physical Biochemistry - University of Regensburg

A malária é uma doença tropical que mata mais de dois milhares de pessoas a cada ano. Seu causador, o parasita *Plasmodium falciparum* passa parte de seu desenvolvimento em eritrócitos humanos, onde é exposto a um ambiente de grande estresse oxidativo. A tioredoxina (PfTrx) participa de um efetivo sistema regulatório, que conserva um ambiente reduzido. A proteína tem em seu sítio ativo duas cisteínas que podem estar na forma oxidada ou reduzida. Este sistema tem sido proposto como um potencial alvo no desenvolvimento de drogas que combatem a doença, o que torna o conhecimento de sua estrutura e sua dinâmica de fundamental importância. No presente estudo, foram utilizadas técnicas de RMN de alta pressão com o objetivo de analisar possíveis similaridades e diferenças entre as PfTrx oxidada e reduzida como resposta à pressão e correlacionar estas com mudanças conformacionais ocorridas após a oxidação. As medidas utilizadas neste trabalho são espectros ¹H-¹⁵N-HSQC (heteronuclear single-quantum coherence) de RMN de alta resolução obtidos em um espectômetro Bruker de 800MHz equipado com crioscóndula. As medidas foram realizadas nas pressões de 30 a 2000 bar, em intervalos de 200 bar. É possível, a partir de uma primeira análise dos dados obtidos, observar uma maior variação dos coeficientes de compressibilidade próximo ao sítio ativo (resíduos 30 ao 33) e de sítios próximos a este (resíduos 70 ao 74 e 90 ao 95). Contudo, resta ainda realizar uma análise mais profunda do comportamento e localização dos resíduos com a pressão, tentando correlacioná-los com possíveis mudanças estruturais na proteína durante a mudança em seu estado de oxidação.

Palavras-chave: RMN de alta pressão. Tioredoxina. *Plasmodium falciparum*.

Referências

- 1 MUNTE, C. E.; BECKER, K.; SCHIMER, R. H.; KLABITZER, H. R. NMR assignments of oxidised thioredoxin from *Plasmodium falciparum*. **Biomolecular NMR Assignments**, v. 3, n. 2, p. 159-161, 2009.
- 2 KREMER, W.; KACHEL, N.; KUWATA K., AKASAKA K., KALBITZER H.R Species-specific differences in the intermediate states of human and syrian hamster prion protein detected by high pressure NMR spectroscopy **Journal of Biological Chemistry**, v. 282, p. 22689-22698, 2007.

IC-20A - Influência da adição de aminoácidos sobre a expressão da proteína recombinante PspA por *E. coli*

CAMPANI JUNIOR, Gilson¹; SARGO, Cíntia Regina²; GONÇALVES, Viviane Maimoni³; ZANGIROLAMI, Teresa Cristina⁴

gilson.campani@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Engenharia Química - Universidade de São Carlos

³ Centro de Biotecnologia - Instituto Butantan

⁴ Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal de São Carlos

Streptococcus pneumoniae é uma bactéria causadora de uma variedade de infecções do trato respiratório. Vacinas constituídas por polissacarídeos (PS) conjugados a proteínas são mais efetivas na proteção de crianças abaixo de 2 anos, o principal grupo de risco. Considerando que a produção de grandes quantidades de proteína é crucial para minimizar o custo da vacina, no presente trabalho, utilizou-se *Escherichia coli* como hospedeiro para expressão de um fragmento da proteína de superfície de pneumococo (PspA), empregado na conjugação aos PS (1). De acordo com a literatura (2), a adição de aminoácidos ricos na composição da proteína recombinante ao meio de cultivo pode aumentar o rendimento na sua expressão. A finalidade desse trabalho foi avaliar a influência da suplementação do meio de cultivo com os aminoácidos alanina, glutamato e lisina, que compõe 16,8, 19,6 e 16,8% do total de aminoácidos da PspA, respectivamente. Os experimentos foram realizados em frascos agitados de 300mL, contendo 100mL de meio definido tendo glicerol como fonte de carbono, com incubação a 300rpm e 37°C na fase de crescimento e 30°C na fase de indução (3). Com a suplementação com 13,3mg/L de alanina, 25,8mg/L de glutamato e 21,9mg/L de lisina, conseguimos um aumento de até 25% no rendimento com indução por IPTG e de até 19,6% com lactose como indutor. Verificamos ainda que concentrações iniciais acima de 66,5mg/L de alanina, 129mg/L de glutamato e 109,5mg/L de lisina no meio de cultivo provocaram a redução da estabilidade do plasmídeo de modo que o efeito positivo da suplementação com aminoácidos foi anulado.

Palavras-chave: Aminoácidos. PspA. *Escherichia coli*.

Referências

1 BRILES, D. E.; HOLLINSHEAD, S.; BROOKS-WALTER, A.; NABORS, G. S.; FERGUSON, L.; SCHILLING, M.; GRAVENSTEIN, S.; BRAUN, P.; KING, J.; SWIFT, A. The potential to use PspA and other pneumococcal proteins to elicit protection against pneumococcal infection. *Vaccine*, v. 18, n.16, p. 1707-1711, 2000.

2 RAMÍREZ, D. M.; BENTLEY, W. E. Enhancement of recombinant protein synthesis and stability via coordinated amino acid addition. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 41, n.5, p. 557-565, 1993.

3 SARGO, C. R. **Aperfeiçoamento de cultivos de alta densidade celular de rE. coli utilizando glicerol como fonte de carbono.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2011.

IC-21A - Clonagem do gene da L-arabinofuranosidase de *Bifidobacterium bifidum* S17 pelo sistema LIC

PINTO, Pedro Henrique Tomaz Torres¹; CAMILO, César Moisés¹; GODOY, Andre Schutzer de¹; POLIKARPOV, Igor¹

pedrohttpinto@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A expressão heteróloga de proteínas apresenta grande importância para o desenvolvimento do conhecimento das características estruturais, funcionais e cinéticas dessas proteínas. Um dos métodos de clonagem mais utilizados é baseado em clivagem do fragmento alvo com enzimas de restrição, seguido de ligação em plasmídeos. Este método, apesar de bastante eficiente não se mostra adaptável a sistemas de clonagem em larga escala, devido ao grande número de etapas e o custo das enzimas. O sistema LIC (ligand independent cloning) consiste num método simples, fácil e relativamente barato comparado com o convencional, pois não necessita uso de enzimas de restrição, T4 DNA ligases e fosfatas alcalinas. Este método baseia-se na atividade exonuclease 3'->5' da T4 DNA polimerase que remove 10 a 15 nucleotídeos das pontas 3' terminais das duas fitas do DNA amplificado. Essas pontas despareadas se emparelham com as caudas complementares dos vetores, também tratados com T4 DNA polimerase, e essa mistura é então transformada em *E. coli*. Deste modo, as bactérias que receberem os plasmídeos acabam realizando a ligação dos fragmentos pareados (1). Comparando em questão de etapas, o convencional necessita de estudo do gene para seleção das enzimas de restrição, uso de DNA ligase para ligação, duas etapas de transformação e duas etapas de seleção. O sistema LIC não usa enzimas de restrição e necessita apenas da adição de uma sequência específica nas pontas dos primers desenhadas para os genes e para os vetores, além do tratamento do fragmento e do plasmídeo com a enzima T4 DNA polimerase. Neste trabalho, apresentamos o processo de clonagem e expressão da enzima da L-arabinofuranosidase da bactéria *Bifidobacterium bifidum* S17, que participa da degradação de uma variedade de polissacarídeos que contém L-arabinose e trabalha sinergicamente com outras hemicelulases na produção de oligossacarídeos e bioconversão de biomassa lignocelulósica em biocombustível (2). A clonagem pelo sistema LIC se mostrou mais adaptável a sistemas de clonagem em larga escala do que o método tradicional.

Palavras-chave: Clonagem. Proteínas recombinantes. LIC.

Referências

- 1 ASLANIDIS, C.; JONG, P.J. de Ligation-independent cloning of PCR products (LIC-PCR). *Nucleic Acids Research*, v.18, n.20, p.6069-74, 1990.
- 2 SOUZA, T.A. et al. Structure of a novel thermostable GH51 alpha-L-arabinofuranosidase from thermotoga petrophila RKU-1. *Protein Science*, v.20, n.9, p.1632-7, Sept. 2011. DOI: 10.1002/pro.693.

IC-22A - Mudanças estruturais em fitocistatinas híbridas analisadas por ressonância magnética nuclear de alta resolução

CAVINI, Ítalo Augusto¹; GARRATT, Richard Charles¹; SILVA, Flávio Henrique²; KALBITZER, Hans Robert³; MUNTE, Claudia Elisabeth¹

italo.cavini@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Genética e Evolução - Universidade Federal de São Carlos

³ Institut fur Biophysik und Physikalische Biochemie - Universität Regensburg

Cistatinas são uma classe de inibidores de cisteíno proteases que, em sua maioria, são fracos inibidores das catepsinas humanas B e L, proteases relacionadas a enfermidades como artrite, doenças neurodegenerativas, distrofia muscular e câncer (1). A orizacistatina-1, uma cistatina encontrada no arroz (*Oryza sativa*), teve sua estrutura resolvida (2) (1EQK.pdb) e é a fitocistatina mais bem caracterizada. Recentemente, novas fitocistatinas foram sintetizadas a partir das sequências da orizacistatina-1 e da canacistatina-1 (*Saccharum officinarum*) (3). Um clone em especial (A10) exibiu um aumento considerável em sua atividade inibitória contra a catepsina B. Sua sequência é basicamente idêntica à da canacistatina-1 (exceto pela região N-terminal), apresentando duas mutações não esperadas (I30T e L97Q). O presente trabalho tem o objetivo de apresentar informações a respeito das mudanças estruturais ocorridas nessas fitocistatinas utilizando a técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) em solução. Primeiramente, foi realizado o assinalamento completo da proteína canacistatina-1 utilizando espectros 2D homonucleares (NOESY), 2D heteronucleares (15N-HSQC e 13C-HSQC) e 3D (HNCA, CBCA(CO)NH, HNCO e H(C)CH-TOCSY), anteriormente obtidos em Regensburg – Alemanha, utilizando um espetrômetro Bruker de 800 MHz com criosonda. Até o momento, 99.0% dos HN, 87.1% dos Ha, 100.0% dos Ca/Cβ e 83.3% dos átomos de cadeia lateral foram assinalados. Com a análise dos deslocamentos químicos de alguns desses átomos (HN, Ha, Ca, Cβ, C' e NH), foi calculado o índice de deslocamento químico (CSI), que prevê a estrutura secundária protéica. Os resultados são coerentes com uma estrutura homodimérica denominada “domain-swapped”. A conformação monomérica também foi identificada nos espectros de RMN e assinalada. O mapeamento das mudanças conformacionais deverá ser realizado através da análise de espectros 15N-HSQC do clone A10 e da mutante reversa (T30I, Q97L).

Palavras-chave: Inibidor de cisteíno proteases. Fitocistatina. Ressonância magnética nuclear.

Referências

- 1 YAN, S.; SLOANE, B.F. Molecular regulation of human cathepsin B: implication in pathologies. *Biological Chemistry*, v.384, n.6, p.845–854, June 2003.
- 2 NAGATA, K.; KUDO, N.; ABE, K.; ARAI, S.; TANOKURA, M. Three-dimensional solution structure of oryzacystatin-I, a cysteine proteinase inhibitor of the rice, *Oryza sativa* L. japonica. *Biochemistry*, v.39, n.48, p.14753-14760, 2000.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 VALADARES, N. F.; DELLAMANO, M.; SOARES-COSTA, A.; HENRIQUE-SILVA, F.; GARRATT, R.C. Molecular determinants of improved cathepsin B inhibition by new cystatins obtained by DNA shuffling. **BMC Structural Biology**, v.10, n. 30, 2010. Disponível em:. Acesso em: 08 set.2011.

IC-23A - Análises preliminares do fator de transcrição PerR (peroxide regulator) de *Enterococcus faecalis* JH2-2 para caracterização estrutural

LIMA, Mariana Zuliani Theodoro de¹; GIARD, Jean-Christophe²; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha¹

marianztdelima@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Laboratoire de Microbiologie de l'Environnement - Université de Caen, França

E. faecalis, um dos grandes patógenos causadores de infecções nosocomiais incluindo infecções urinárias e até endocardites, é uma bactéria Gram positiva natural do trato intestinal humano e de outros animais. Resiste a extremos de temperatura e pH, estresse oxidativo e altas concentrações de sais. O aumento da resistência a antibióticos resultando em falhas terapêuticas somado ao danos causados pelas linhagens virulentas resultaram na exploração dos genes de regulação de *E. faecalis* envolvidos com resistência e virulência. Por isso, foi estudada a proteína PerR (Peroxide Regulator), um fator de transcrição relacionado com o controle da virulência. *E. coli* M15 (pREP4) contendo o gene perR clonado no vetor de expressão pQE30(QIAGEN) foi submetida à padronização da expressão da proteína PerR com cauda de histidina (His6-PerR), purificação e estudos preliminares sobre a sua estrutura secundária e seu estado de agregação. A melhor condição produzindo 1,75 mg/L foi possível realizando expressão por 3 horas em 1 litro de meio 2XYT, a 37°C após indução (DO600= 0,5) com 1 mM de IPTG. As células centrifugadas foram suspensas em tampão Tris-HCl 50 mM, NaCl 200 mM, 10 mM de imidazol, 10% glicerol em pH 7,5. Após a lise por sonicação, a proteína foi purificada por cromatografia de afinidade em coluna de níquel Ni-NTA Superflow (QIAGEN) com eluição em 20 mL de tampão Tris-HCl 50 mM, NaCl 200mM, 300 mM de imidazol, pH 7,5 seguida de cromatografia por exclusão molecular em FPLC AKTApurifier (GE Healthcare) com coluna cromatográfica Hiload 16/60 Superdex 75 (GE Healthcare) em tampão Tris-HCl 20 mM, NaCl 200mM. Observações feitas realizando-se Dicroísmo Circular apresentam informações acerca da temperatura de desnaturação protéica próximo aos 40°C e Dynamic Light Scattering (DLS) indicou aumento no estado de agregação a partir de 50°C. Ensaios realizados para o estudo da proteína permitem um avanço na obtenção das características da mesma para que em passos futuros, possam-se realizar testes de inibição protéica que possam atenuar os danos causados pela infecção por *E. faecalis*.

Palavras-chave: PerR. Virulência. *Enterococcus faecalis*.

Referências

- 1 VERNEUIL, N. et al. Contribution of a PerR-like regulator to the oxidative-stress response and virulence of *Enterococcus faecalis*. **Microbiology**, Reading, v. 151, n. 12, p. 3997-4004, Dec. 2005. DOI: 10.1099/mic.0.28325-0.
- 2 TRAORÉ, D. A. K. et al. Crystal structure of the apo-PerR-Zn protein from *Bacillus subtilis*. **Molecular Microbiology**, Oxford, v. 61, n. 5, p. 1211-1219, Aug. 2006. DOI: 10.1111/j.1365-2958.2006.05313.x.

IC-24A -Estudo do domínio de ligação à celulose da enzima celobiohidrolase I

MELLO, Bruno Luan¹; POLIKARPOV, Igor¹

bruno.luan.mello@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A celulose é um polímero formado por unidades de D-glicose unidas por ligação β -1,4-glicosídicas. Esses polímeros podem se empacotar formando fibras, as quais são cristalinas na natureza, o que dificulta a sua hidrólise (1). A maioria das celulases possui uma organização bifuncional composta por dois domínios conectados por uma cadeia de aminoácidos sem estrutura secundária e superglicosilada, tal como a celobiohidrolase I do fungo filamentoso *Trichoderma harzianum* – foco deste estudo. Um dos domínios é dedicado a ligação à celulose e é chamado de domínio de ligação à celulose (CBD do inglês). O outro domínio possui a maquinaria catalítica. Muitos estudos correlacionam diretamente a eficiência de degradação de celulose cristalina com a eficiência de adsorção da enzima (2). Também mostram que a remoção do CBD geralmente resulta em um decréscimo de cerca de 50-80% da atividade de uma dada celulase em substrato insolúvel, mas não em substrato solúvel (3, 4). Assim, um estudo do mecanismo de ação do CBD é de extrema importância para o entendimento da hidrólise da celulose, o que é necessário para o desenvolvimento do etanol de 2^a geração. Neste trabalho o CBD da celobiohidrolase I foi clonado, expressado em *Escherichia coli* e purificado. Isto permitiu o estudo de sua curva de adsorção, o desenvolvimento de um método alternativo para comparação da afinidade de ligação de diferentes CBDs à celulose e testes de sua cristalização.

Palavras-chave: Etanol de 2^a geração. Celulase. Domínio de ligação à celulose.

Referências

- 1 HON, D. N. S. Cellulose: a random walk along its historical path. **Cellulose**, Dordrecht, v. 1, n. 1, p. 1-25, Mar. 1994. DOI: 10.1007/BF00818796.
- 2 KLYOSOV, A. A. Trends in biochemistry and enzymology of cellulose degradation. **Biochemistry**, Washington, DC, v. 29, n. 47, p. 10577-10585, Nov. 1990. DOI: 10.1021/bi00499a001.
- 3 TOMME, P.; VAN TILBEURGH, H.; PETTERSSON, G.; VAN DAMME, J.; VANDEKERCKHOVE, J.; KNOWLES, J.; TEERI, T.; CLAEYSSENS, M. Studies of the cellulolytic system of *Trichoderma reesei* QM 9414: analysis of domain function in two cellobiohydrolases by limited proteolysis. **European Journal of Biochemistry**, Oxford, v. 170, n. 3, p. 575-581, 1988. DOI: 10.1111/j.1432-1033.1988.tb13736.x.
- 4 GILKES, N. R.; WARREN, R. A. I.; MILLER, R. C.; KILBURN, D. G. Precise excision of the cellulose binding domains from two *Cellulomonas fimi* cellulases by a homologous protease and the effect on catalysis. **The Journal of Biological Chemistry**, Bethesda, v. 263, n. 21, p. 10401-10407, July 1988.

IC-25A - Produção heteróloga das fosfodiesterases c-di-GMP-específicas da família HD-GYP de *Pseudomonas aeruginosa* e *Xanthomonas axonopodis*

TORRES, Naiara Utimura¹; CHELESKI, Juliana¹; NAVARRO, Marcos V. A. S.¹
nai.15-04-91@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Organismos patógenos vêm sendo alvo de estudos há séculos no mundo científico. Um tipo diferente de comunidade celular está atraindo destaque devido a maior resistência contra antibióticos: o biofilme. Este é um aglomerado celular, diferente de sua forma suspensa, que produz uma matriz polimérica protetora entre as células. Pela proximidade celular, as células apresentam facilidade de transferência gênica - por exemplo, genes de resistência - fazendo com que esta seja a principal forma de colonização resistente encontrada em infecções (1). A molécula mensageira responsável pela formação de biofilme é a guanosina monofosfato (3'-5')-cíclica dimérica (c-di-GMP), controlando a adesão, motilidade, secreção e aumento na citotoxicidade (2). A regulação do c-di-GMP depende de proteínas com resíduos altamente conservados que dão nome aos seus domínios: diguanilato ciclases (com domínio GGDEF que sintetiza o mensageiro) e fosfodiesterases (com domínio EAL ou HD-GYP que linearizam c-di-GMP à GMP linear dimérico ou 5'-pGpG). Em adição, as HD-GYP podem degradar 5'-pGpG em GMP (3, 4). De todas as enzimas envolvidas na biossíntese de c-di-GMP, o domínio HD-GYP é o menos estudado. No entanto, sabe-se que em *Xanthomonas campestris* pv. *campestris* as HD-GYP atuam na síntese de polissacarídeos extracelulares e fatores de virulência e regulam negativamente a formação de biofilmes [5]. Visando uma maior compreensão desse membro das vias de sinalização mediadas por c-di-GMP, todas as proteínas contendo o domínio HD-GYP de *Xanthomonas axonopodis* e *Pseudomonas aeruginosa* (3 em cada organismo) foram clonadas a partir dos respectivos DNAs genômicos e sub-clonadas no vetor de expressão pET-SUMO. Testes de expressão heteróloga em *E. coli* mostraram que todas as proteínas são solúveis e protocolos de purificação envolvendo cromatografias de afinidade em resina Talon e exclusão molecular permitiram a obtenção de grande quantidade de proteína pura. Caracterizações das atividades enzimáticas e ensaios iniciais de cristalização encontram-se em andamento.

Palavras-chave: HD-GYP. c-di-GMP. Biofilme.

Referências

- 1 PARSEK, M.R.; SINGH, P.K. Bacterial biofilms: an emerging link to disease pathogenesis. *Annual Review of Microbiology*, v. 57, p. 677-701, 2003. DOI: 10.1146/annurev.micro.57.030502.090720.
- 2 ROSS, P.; MAYER, R.; BENZIMAN, M. Cellulose biosynthesis and function in bacteria. *Review of Microbiology*, v. 55, n.1, p. 35-58, 1991.

3 PAUL, R. Cell cycle-dependent dynamic localization of a bacterial response regulator with a novel di-guanylate cyclase output domain. **Genes & Development**, v. 18, n.6, p. 715–727, 2004.

4 SLATER, H.; ALVAREZ-MORALE, A.; BARBER, C. E.; DANIELS, M. J.; DOW, J. M. A two-component system involving an HD-GYP domain protein links cell-cell signaling to pathogenicity gene expression in *Xanthomonas campestris*. **Molecular Microbiology**, v. 38, n.5, p. 986-1003, 2000.

5 DOW, J. M.; CROSSMAN, L.; FINDLAY, K.; HE, Y. Q.; FENG, J. X.; TANG, J. L. Biofilm dispersal in *Xanthomonas campestris* is controlled by cell-cell signaling and is required for full virulence to plants. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 100, n. 19, p. 10995-11000, 2003.

IC-26A - Clonagem, expressão e purificação de diguanilato ciclases bacterianas para estudos estruturais e desenvolvimento de inibidores

SILVA, Everton Edesio Dinis¹; WIGGERS, Helton José¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹

everton.edesio@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

As bactérias podem deixar a vida planctônica, dependendo de estímulos externos, para formar conglomerados celulares chamados biofilmes. O biofilme confere às bactérias menor susceptibilidade à ação de antibióticos e consequentemente desenvolvimento da resistência. Além disso o biofilme provoca inconvenientes econômicos como corrosão de instalações, entupimento de canos e contaminação de reservatórios. Recentemente, foi demonstrado que esta transição fenotípica é intermediada pelo aumento de níveis intracelulares do mensageiro secundário diguanilato dimérico cíclico (c-di-GMP). Ele é sintetizado a partir de duas guanosinas trifosfato (GTP) por enzimas diguanilato ciclases (DGC), caracterizadas pelo domínio GGDEF. Assim as DGCs bacterianas emergem como alvos atrativos para o desenvolvimento de inibidores, os quais ainda têm potenciais aplicações como coadjuvantes a antibióticos e na elaboração de materiais que previnam a adesão bacteriana em implantes ou cateteres, por exemplo. Nesse trabalho foi realizado uma busca de genes que codificam proteínas com o domínio GGDEF em organismos que possuem a forma de vida em biofilmes Xanthomonas, Pseudomonas e Escherichia coli. Os seguintes genes foram selecionados para clonagem, por identificação no banco digital Kegg : XAC2810, XAC2482, XAC0614, XAC1992, JW59430, JW1528, PA14_45930, PA14_23130 e PA14_53310. A partir do DNA genômico dos organismos, os genes foram clonados com sucesso no vetor pET SUMO. As proteínas foram expressas em Rosetta II e testes de purificação em coluna de afinidade de cobalto foram realizados. O projeto se encontra na etapa da expressão do gene JW1518 que codifica a enzima YdeH de E. coli (JW1528) que possui alta atividade já descrita na literatura, a qual será utilizada para padronização dos ensaios cinéticos e também estudos estruturais. Os ensaios de atividade e inibição nesta enzima serão utilizados como padrão para as demais proteínas em estudo.

Palavras-chave: Biofilme. Diguanilato ciclases. Inibidores.

Referências

- 1 YAN, H.B. ; CHEN, W.X. 3 ',5 '-Cyclic diguanylic acid: a small nucleotide that makes big impacts. **Chemical Society Reviews**, v. 39, n. 8, p. 2914-2924, 2010.
- 2 ANDERSON, G.G. ; O'TOOLE ,G.A. Innate and induced resistance mechanisms of bacterial biofilms. **Bacterial Biofilms**, v. 322, p. 85-105, 2008.
- 3 CHAN, C. et al. Structural basis of activity and allosteric control of diguanylate cyclase. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 101, n. 49, p. 17084-17089, 2004.

IC-27A - Estudos estruturais e de flexibilidade conformacional da proteína glucosamina-6-fosfato desaminase de *Escherichia coli*

TEIXEIRA, Francesco Brugnera¹; CAMARA, Amanda Souza¹; REBOREDO, Eduardo Horjales¹

francesco.teixeira@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O estudo de propriedades dinâmicas de proteínas e sua relação com a atividade ainda encontra limitações. Porém, nos últimos anos, novas tecnologias de cristalização e coleta de dados cristalográficos foram introduzidas gerando grande avanço. Para citar algumas, temos disponível coleta automatizada, linhas de maior intensidade de feixe e melhor focalização, novos detectores de silício com nível de saturação elevado e baixo ruído de fundo. Nossa estudo se baseia na proteína alostérica glucosamina-6-fosfato desaminase de *Escherichia coli*. Determinaremos a estrutura cristalográfica da proteína com a maior resolução possível (atualmente conhecida a 1,9 Å de resolução) e analisaremos os parâmetros de deslocamentos atômicos no cristal para associar a flexibilidade estrutural da enzima com suas propriedades alostéricas.

Palavras-chave: Alosterismo. Flexibilidade estrutural. Cristalografia.

Referências

- 1 RUDIÑO-PIÑERA, E.; MORALES-ARRIETA, S.; ROJAS-TREJO, S. P. & HORJALES., E. Structural flexibility, an essential component of the allosteric activation in *Escherichia coli* glucosamine-6-phosphate deaminase. **Acta Crystallography D**, v. 58, n. 1, p.10-20, 2002.
- 2 HORJALES, E.; ALTAMIRANO, M. M.; CALGAGNO, M. L.; GARRATT, R.C.; OLIVA, G. The allosteric transition of glucosamine-6-phosphate deaminase: the structure of the T state at 2.3 Å resolution. **Structure**, v.7, n. 5, p. 527–537, 1999.

IC-28A - Expressão heteróloga e purificação de proteínas de *Trypanosoma brucei* envolvidas no processo de splicing

MAKKI, Raphaela¹; THIEMANN, O. H.¹

raphaela.makki@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Vários parasitas protozoários existentes na família *Trypanosomatidae*, incluindo vários agentes de doenças humanas. Várias linhas de evidência sugerem que diferenças importantes estão presentes entre a tradução eo processamento de mRNA (trans-splicing) em sistemas de tripanosomatídeos e outros eucariotos. Neste contexto, complexos pequenos de RNA e proteínas, que são chamados de pequenos ribonucleoproteínas nuclear (U snRNPs), têm um papel essencial no mRNA de pré-processamento, principalmente durante o splicing. Splicing de RNA é realizado pela spliceosome, que consiste na U1, U2, U4, U5 e U6 U snRNPs partículas e não snRNP proteínas. As ribonucleoproteínas são complexos que consistem de pequenos RNAs uridina-ricos (U snRNAs) que interagirem com as proteínas comuns Sm e também com as proteínas que são específicas para cada snRNP (1). U5-Cwc21 é uma proteína específica que pertence à snRNP U5, e apesar de altamente conservada entre várias espécies de tripanossomatídeos, não é detectada em eucariotos superiores. Esta proteína tem cerca de 16 kDa e experimentos de interferência de RNA realizados em *T. brucei* mostraram a essencialidade do Cwc21 para a viabilidade celular cuja silenciamento leva defeitos nas reações de cis-e trans-splicing (2). U5-Cwc21 é predominantemente localizada no núcleo e forma um complexo estável com Sm e quatro U5 snRNP proteínas específicas do complexo 35S (3). O quadro de leitura aberto de *T. brucei* U5-Cwc21 foi clonado no vetor pET28a e transformado em *E.coli* BL21 (DE3) codon plus, ensaios de expressão realizados com 0,4 mM de IPTG, a 20 ° para 8 horas mostraram a expressão de um proteína com peso molecular em torno de 25kDa. Cromatografia de afinidade com níquel imobilizado (IMAC) usando gradiente linear de imidazol (10-500mm) demonstraram a purificação de uma proteína com o mesmo peso molecular e Cromatografia de Exclusão Tamanho sugeriu um dímero como o estado oligomérica predominante para U5-Cwc21. A Intenção dos experimentos seguintes é otimizar as etapas de purificação e começar os ensaios de cristalizações.

Palavras-chave: Cwc21. Splicing. *Trypanosoma brucei*.

Referências

- 1 MAYER, M. G.; FLOETER-WINTER, L .M. Pre-mRNA trans-splicing: from kinetoplastids to mammals, an easy language for life diversity. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 100, n. 5, p. 501-513, 2005.
- 2 AMBROSIO, D. L.; LEE, J. H. PANIGRAHI, A. K.; NGUYEN, T. N.; CICARELLI, R. M. B. GÜNZL, A. Spliceosomal proteomics in *Trypanosoma brucei* reveal new RNA splicing factors. **Eukaryotic Cell**, v. 8, n. 7, p. 990-1000, 2009.
- 3 SILVA, M. T.; AMBROSIO, D. L.; TREVELIN, C. C.; WATANABE, T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; VALENTINI, S. R.; CICARELLI, R. M. B. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, Rio de Janeiro, v. 106, n. 2, p. 130-138, March 2011.

IC-28B - Heterologous expression and purification of *Trypanosoma brucei* protein involved in splicing process

MAKKI, Raphaela¹; THIEMANN, O. H.¹

raphaela.makki@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Several protozoan parasites exist in the *Trypanosomatidae* family, including various agents of human diseases. Multiple lines of evidence suggest that important differences are present between the translation and the mRNA processing (trans-splicing) in systems of trypanosomatids and other eukaryotes. In this context, small complexes of RNA and proteins, which are named small nuclear ribonucleoproteins (U snRNPs), have an essential role in pre-mRNA processing, mainly during splicing. RNA splicing is carried out by the spliceosome, which consists of the U1, U2, U4, U5 and U6 U snRNPs particles and non-snRNP proteins. The ribonucleoproteins are complexes that consist of small uridine-rich RNAs (U snRNAs) and interact with common Sm proteins and proteins that are specific for each snRNP (1). U5-Cwc21 is a specific protein that belongs to the U5 snRNP, and although highly conserved among several trypanosomatid species, it is not detected in higher eukaryotes. This protein has around 16 kDa and RNA interference experiments carried out in *T. brucei* showed the essentiality of Cwc21 for cell viability which leads to silencing defects in the cis- and trans-splicing reactions (2). U5-Cwc21 is predominantly localized in the nucleus and forms a stable complex with Sm and four U5 snRNP specific proteins in the 35S complex (3). The Open Reading Frame of *T. brucei* U5-Cwc21 was cloned in pET28a vector, transformed in E.coli BL21 (DE3) codon plus and expression assays carried out with 0,4mM of IPTG, at 20° for 8 hours demonstrated the expression of a protein with molecular weight around 25kDa. Affinity chromatography with Immobilized nickel (IMAC) using linear gradient of imidazole (10-500mM) demonstrated a purification of a protein with same molecular weight and Size Exclusion Chromatography suggest a dimer as the predominant oligomeric state to U5-Cwc21. The intention is to optimize the experiments following the steps of purification and crystallization trials begins.

Keywords: Cwc21. Splicing. *Trypanosoma brucei*.

References

- 1 MAYER, M. G.; FLOETER-WINTER, L .M. Pre-mRNA trans-splicing: from kinetoplastids to mammals, an easy language for life diversity. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 100, n. 5, p. 501-513, 2005.
- 2 AMBROSIO, D. L.; LEE, J. H. PANIGRAHI, A. K.;NGUYEN, T. N.; CICARELLI, R. M. B. GÜNZL, A. Spliceosomal proteomics in *Trypanosoma brucei* reveal new RNA splicing factors. **Eukaryotic Cell**, v. 8, n. 7, p. 990-1000, 2009.
- 3 SILVA, M. T.; AMBROSIO, D. L.; TREVELIN, C. C.; WATANABE, T. F.; LAURE, H. J.; GREENE, L. J.; ROSA, J. C.; VALENTINI, S. R.; CICARELLI, R. M. B. New insights into trypanosomatid U5 small nuclear ribonucleoproteins **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, Rio de Janeiro, v. 106, n. 2, p. 130-138, March 2011.

IC-29A - Estudos estruturais e cinéticos das enzimas Timidilato Sintase (SmTS) e Citidina Desaminase (SmCytADA) de *Schistosoma mansoni*

SERRÃO, V.H.B.¹; SOUZA, M. C.¹; PEREIRA, H. M.¹; THIEMANN, O.H.¹; GARRATT, R. C.¹

matheus.chiaradia.souza@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

As enzimas Timidilato Sintase (TS) e Citidina Desaminase (CytADA), ambas de *Schistosoma mansoni*, pertencem às vias metabólicas essenciais ao organismo do agente causador de doença endêmica negligenciada. Estas moléculas participam de maneira direta no metabolismo de nucleotídeos seja para a obtenção energética (síntese de ATP e similares) ou estrutural (como os utilizados na síntese de RNA e DNA) sendo assim, essenciais à vida do organismo. Estudos filogenéticos e moleculares em *Schistosoma mansoni* têm identificado 16 genes codificantes de interesse para a realização do projeto ao qual esse projeto de iniciação científica se engloba, tendo como objetivo caracterizar dois desses alvos moleculares. Este trabalho se insere dentro de um dos projetos do CBME e tem como objetivo clonar, expressar em *Escherichia coli* em forma solúvel e obter informações estruturais, bioquímicas e cinéticas das enzimas Timidilato Sintase (SmTS) e Citidina Desaminase (SmCytADA), todas de *Schistosoma mansoni*. Estudos estruturais serão feitos utilizando técnicas espectroscópicas como dicroísmo circular e fluorescência bem como caracterização da atividade catalítica através de ensaios de atividade enzimática por métodos fluorimétricos. Também, serão realizados testes de cristalização para a utilização da técnica de cristalografia que consiste na difração de raios-X sobre o cristal formado. A partir desta técnica, obtivemos a configuração tridimensional dessas enzimas. Com esses resultados, poderemos acrescentar informações fundamentais para o conhecimento estrutural e bioquímico de vias importantes do organismo e assim, favorecer ao descobrimento de novos potenciais fármacos.

Palavras-chave: Timidilato sintase. Citidina desaminase. *Schistosoma mansoni*.

Referências

- 1 PEREIRA, H. M. **Enzima purina nucleotídeo fosfodrilase de *S. mansoni*:** estruturas cristalográficas, estudos cinéticos e descoberta de novos ligantes. 2003. 202 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

IC-30A – Padronização da expressão e purificação da Ers (Enterococcal Regulator of Survival)

GUTIERREZ, Raissa Ferreira¹; GIARD, Jean-Christophe²; CAMARGO, Ilana L. B. C.¹
raissa.gutierrez@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Laboratoire de Microbiologie de l'Environnement - Université de Caen

Enterococcus faecalis é membro da microbiota digestiva de humanos e outros animais e também é um patógeno oportunista, podendo causar várias doenças como: infecção no trato urinário, no trato biliar, endocardites, bacteremia e septicemia. É o principal agente de infecções nosocomiais em pacientes imunodeprimidos em todo o mundo (1). Por isso, a descoberta de novos alvos moleculares para o tratamento de doenças causadas por *E. faecalis* é necessária. O objetivo deste estudo foi padronizar a expressão e purificação da proteína Ers (Enterococcal Regulator of Survival), fator de transcrição responsável pela regulação de genes de virulência em *E. faecalis* que compartilha 22% de identidade e 50% de similaridade com PrfA, a maior reguladora de genes de virulência de *Listeria monocytogenes* (1). O gene ers de *E. faecalis* JH2-2 foi克隆ado no vetor de expressão pQE30 em *E. coli* M15(pREP4) (2). A proteína Ers foi expressa fusionada a uma cauda de 6 histidinas na porção N-terminal (His6-Ers). Foram feitos vários experimentos a fim de padronizar sua expressão variando alguns parâmetros como meio de cultura, temperatura e tempo de expressão, bem como tampão para sua solução. His6-Ers foi melhor expressa em meio de cultura 2xYT suplementado com 100 µg/mL de ampicilina e 25 µg/mL de kanamicina, sob agitação de 200 rpm a 37°C até uma DO600 de 0.5. A expressão foi induzida com 1 mM de IPTG a 20°C por 2 horas seguido de centrifugação a 6000 rpm a 4°C por 30 minutos. O pellet foi suspenso em tampão 50 mM Tris-HCl, 300 mM NaCl, 10% glicerol, 5 mM imidazol e pH 8 e lisado por sonicação na presença de 0,2 mM PMSF. Os resultados preliminares após centrifugação para eliminação de restos celulares, mostra que His6-Ers foi purificada por cromatografia de afinidade e eluída com alta pureza da coluna de níquel a 200 mM de imidazol. Resta apenas observar sua conformação em solução após cromatografia por gel filtração para dar continuidade aos estudos da His6-Ers.

Palavras-chave: *Enterococcus faecalis*. Ers. Virulência.

Referências

- 1 GIARD, J.-C.; RIBOULET, E.; VERNEUIL, N.; SANGUINETTI, M.; AUFFRAY, Y.; HARTKE, A. Characterization of Ers, a PrfA-like regulator of *Enterococcus faecalis*. **FEMS Immunology and Medical Microbiology**, v. 46, n. 3, p. 410-418, 2006.
- 2 RIBOULET-BISSON, E.; SANGUINETTI, M.; BUDIN-VERNEUIL, A.; AUFFRAY, Y.; HARTKE, A.; GIARD, J.-C. Characterization of the Ers regulon of *Enterococcus faecalis*. **Infection Immunity**, v. 76, n. 7, p. 3064-3074, 2008.

IC-31A – Estudo da RNA polimerase do Leishmania virus – um vírus que controla a severidade da leishmaniose

LIMA, A. L.¹; SOUZA, M. M.¹; THIEMANN, O. H.¹

ana.llima@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Leishmaniose é uma doença infecciosa causada por um protozoário parasita do gênero *Leishmania*, ordem Kinetoplastida, e é considerada pela Organização Mundial de Saúde (OMS) como uma Doença Tropical Negligenciada. Os mais afetados são a população de países tropicais em desenvolvimento. Foi identificada a presença de um vírus de RNA fita dupla em algumas espécies de *Leishmania*, conhecido com o LRV – *Leishmania* RNA Vírus (1). Comumente, capsídeos virais tem função estrutural de preservação da estrutura viral e proteção do genoma viral. Contudo o capsídeo do LRV apresenta atividade enzimática endoribonucleática que pode estar associada com a maturação e processamento do RNA, o que torna os estudos estruturais desse vírus ainda mais animadores e interessantes (2). Em fevereiro deste ano em artigo publicado na revista *Science* evidenciou-se que este vírus controla a severidade da doença, mudando a resposta imune do paciente, estando intimamente ligado com as metástases das lesões (3). Este trabalho trata da expressão heteróloga, em *Escherichia coli*, da proteína RNA polimerase do vírus. Para tanto, foi gentilmente cedido pela Dra. Jean Patterson, University of Texas, o DNA genômico do LRV, com o qual foi feita uma reação de PCR para obtenção do gene codificador para a RNA polimerase e transformados em diferentes cepas de *E. coli*. Das cepas testadas a que apresentou o melhor resultado foi a BL21 pLys, passou-se então por um processo de purificação por coluna de afinidade. Em algumas linhagens após a indução as cepas morreram sugerindo que a proteína seja letal para *E. coli*. Entre as perspectivas de futuros trabalhos está a utilização um outro sistema de expressão e fazer uma possível caracterização dessa proteína e ver sua associação com a proteína capsidial, o que poderia ser facilitado com uma colaboração de um laboratório internacional.

Palavras-chave: RNA polimerase. LRV1-4. *Leishmania*.

Referências

1 TARR, P. I.; ALINE, R. F.; SMILEY, B. L.; SCHOLLER, J.; KEITHLY, J.; STUART, K. LRV1: a candidate RNA virus of *Leishmania*. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 85, n. 24, p. 9572-5, 1988.

2 RO, Y.T. et al. Evidence that the fully assembled capsid of *Leishmania* RNA virus 1-4 possesses catalytically active endoribonuclease activity. *Experimental and Molecular Medicine*, v. 36 , n. 2 p. 145 -156 , 2004.

3 IVES, A. et al. *Leishmania* RNA virus controls the severity of mucocutaneous Leishmaniasis *Science*, v.331, n. 6018, p.775-778, 2011.

IC-32A – Expressão, purificação e caracterização estrutural da Selenofosfato Sintetase de *Naegleria gruberi*

MARTINS, Juliana Quintanilha¹; SILVA, Ivan Rosa e¹; SILVA, Marco Túlio Alves da¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹
juu.quintanilha@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Selenofosfato sintetase (SelD/SPS) é uma enzima participante da via de biossíntese e inserção de selenocisteínas e catalisa a conversão de seleneto e adenosina 5-trifosfato (ATP) em monoselenofosfato (1,2). Em *Naegleria gruberi*, eucarioto de vida livre, SelD/SPS apresenta dois domínios interligados por uma região de baixa complexidade estrutural (3). Por meio do alinhamento da sequência de aminoácidos (BLASTp), observou-se que o domínio C-terminal possui identidade sequencial acima de 40% com selenofosfato sintetases, pertencentes à superfamília PurM. Observamos que o domínio N-terminal apresenta identidade com metiltransferases S-adenosil-L-metionil-dependentes (SMART). A fase aberta de leitura que codifica para SPS/SelD(SelD-FL) e somente a sequência referente ao domínio SELD (D.SelD) foram amplificadas por PCR, clonadas em vetor de expressão pET-32a(+) e transformadas em *E. coli* BL21 (DE3) codon plus. Testes de expressão usando diferentes concentrações de indutor, tempo e temperatura demonstraram a expressão de proteínas com massa molecular de aproximadamente 97 kDa para a SelD-FL e 58 kDa para D.SelD, sendo considerada a melhor condição de expressão a concentração de 0,5 mM de IPTG a 20°C por 6 horas. Até o momento, somente a construção D. SelD foi submetida à Cromatografia de Afinidade em coluna HisTrap HP 5 mL (GE), sendo observado o maior volume de eluição protéica com a concentração de aproximadamente 130 mM de Imidazol. A amostra resultante foi submetida à purificação por Cromatografia de Exclusão Molecular em SUPERDEX 200 10/300 (GE) e observamos picos de eluição correspondentes a proteínas de 96 kDa e 230 kDa, o que sugere que D. SelD se organiza na forma de dímeros e tetrâmeros em solução. Ensaios de cristalização do D. SelD resultaram na formação de precipitados cristalinos e amorfos. Pretende-se clonar a sequência referente ao domínio N-terminal em vetor de expressão pET-32a(+), purificar a proteína SPS/SelD(SelD-FL) por Cromatografia de Afinidade e otimizar as etapas de purificação e cristalização do D.SelD.

Palavras-chave: Selenofosfato sintetase. SPS/SelD. *Naegleria gruberi*

Referências

- 1 ITOH, Y.; SEKINE, S.; MATSUMOTO, E.; AKASAKA, R.; TAKEMOTO, C.; SHIROUZU, M.; YOKOYAMA, S. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology.** v. 385, p. 1456-69, 2009.
- 2 ALLMANG, C.; WURTH, L.; KROL, A. The selenium to selenoprotein pathway in eukaryotes: More molecular partners than anticipated. **Biochimica et Biophysica Acta.** v. 1790, p. 1415–1423, 2009.

3 FRITZ-LAYLIN, L.K.; PROCHNIK, S. E.; GINGER, M. L.; DACKS, J. B.; CARPENTER, M. L.; FIELD, M. C.; KUO, A.; PAREDEZ, A.; CHAPMAN, J.; PHAM, J.; SHU, S.; NEUPANE, R.; CIPRIANO, M.; MANCUSO, J.; TU, H.; SALAMOV, A.; LINDQUIST, E.; SHAPIRO, H.; LUCAS S.; GRIGORIEV, I.V.; CANDE, W.Z.; FULTON, C.; ROKHSAR, D. S.; DAWSON, S.C. The genome of *Naegleria gruberi* illuminates early eukaryotic versatility. *Cell*, v. 140, n. 5, p. 631-42, 2010.

IC-32B – Expression, purification and structural characterization of Selenophosphate synthetase of *Naegleria gruberi*

MARTINS, Juliana Quintanilha¹; SILVA, Ivan Rosa e¹; SILVA, Marco Túlio Alves da¹; THIEMANN, Otávio Henrique¹
juu.quintanilha@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Selenophosphate synthetase (SelD/SPS) is an enzyme that participates in the selenocysteines biosynthesis and insertion pathway, and catalyzes the conversion of selenide and adenosine-5'-triphosphate (ATP) into monoselenophosphate (1,2). In *Naegleria gruberi*, free-living eukaryote (3), SelD/SPS shows two domains connected by a low structural complexity region. By the alignment of the amino acid sequence (BLASTp), it was observed that the C-terminal domain has more than 40% of sequential identity with Selenophosphate synthetases and belongs to the PurM superfamily. We observed that the N-terminal domain has identity with the catalytic conserved domain present in S-adenosyl-L-methionyl-dependent methyltransferases (SMART). The open reading frame that codifies for full lane SPS/SelD (SelD-FL) and the sequence corresponding to the SELD domain (D. SELD) was amplified by PCR, cloned in pET-32a(+) expression vector and transformed into *E. coli* BL21 (DE3) codon plus. Expression tests using different inductor concentrations, time and temperature showed protein expression with molecular mass of approximately 97 kDa for SelD-FL and 58 kDa for D. SELD, and the best expression condition was at 0,5 mM IPTG at 20°C by 6 hours. Until now, only the D. SELD construction has been submitted to Affinity Chromatography in HisTrap HP 5 mL column (GE) and we observed the larger protein elution volume with the addition of elution buffer with 132,5 mM Imidazol. The resulting sample was submitted to further purification through Molecular Exclusion Chromatography in SUPERDEX 200 10/300 column (GE) and we observed elution summits corresponding to proteins of 96 kDa e 230 kDa, what suggests that D. SELD organizes itself as dimers and tetramers in solution. Crystallization screening of D. SELD resulted in crystalline and amorphous precipitates. We intend to clone the N-terminal domain nucleotide sequence in pET-32a(+) expression vector, to purify the SPS/SelD(SelD-FL) recombinant protein by Affinity Chromatography and to optimize the purification and crystallization stages of D. SELD.

Keywords: Selenophosphate synthetase. SPS/SelD. *Naegleria gruberi*.

References

- 1 ITOH, Y.; SEKINE, S.; MATSUMOTO, E.; AKASAKA, R.; TAKEMOTO, C.; SHIROUZU, M.; YOKOYAMA, S. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**. v. 385, p. 1456-69, 2009.
- 2 ALLMANG, C.; WURTH, L.; KROL, A. The selenium to selenoprotein pathway in eukaryotes: More molecular partners than anticipated. **Biochimica et Biophysica Acta**. v. 1790, p. 1415–1423, 2009.

3 FRITZ-LAYLIN, L.K.; PROCHNIK, S. E.; GINGER, M. L.; DACKS, J. B.; CARPENTER, M. L.; FIELD, M. C.; KUO, A.; PAREDEZ, A.; CHAPMAN, J.; PHAM, J.; SHU, S.; NEUPANE, R.; CIPRIANO, M.; MANCUSO, J.; TU, H.; SALAMOV, A.; LINDQUIST, E.; SHAPIRO, H.; LUCAS S.; GRIGORIEV, I.V.; CANDE, W.Z.; FULTON, C.; ROKHSAR, D. S.; DAWSON, S.C. The genome of *Naegleria gruberi* illuminates early eukaryotic versatility. *Cell*, v. 140, n. 5, p. 631-42, 2010.

IC-33A – Inserção do elemento SECIS em selenoproteínas de *Trypanosoma brucei*

BELLINI, Natália Karla¹; THIEMANN, Otávio Henrique²; EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti¹

natbellini@hotmail.com

¹ Centro de Ciências Biológicas e da Saúde – Universidade Federal de São Carlos

² Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O Selênio é um micro-nutriente essencial para diversas formas de vida e a ele são atribuídos muitos benefícios à saúde humana (retardamento da progressão da AIDS em HIV soropositivos e prevenção do câncer, como exemplos (1). O aminoácido selenocisteína (Sec) representa a principal forma biológica de selênio e sua incorporação ao peptídeo nascente é em posições específicas do códon UGA, que normalmente é reconhecido como códon de parada. Para incorporá-lo nas proteínas é necessário vários componentes, dentre eles está o elemento SECIS (“Seleno Cystein Insertion Sequence”), uma estrutura em alça na região 3’ do mRNA das selenoproteínas que auxilia no reconhecimento do códon UGA como um sinal de inserção de Sec (2). Nossa grupo vem trabalhando com proteínas mutantes (Cys no lugar de Sec) da SelK e SelTryp de *T. brucei*. Para obter selenoproteínas destes mutantes faz-se necessário a inserção do elemento SECIS e troca do Cys para Sec. O fragmento de DNA correspondente aos genes de selk e seltryp serão digeridos pelas enzimas de restrição apropriadas, purificados e então ligados ao fragmento de DNA correspondente ao elemento SECIS e a mutação (Cys-Sec) que contenha sítios para enzimas de restrição compatíveis. A mistura de ligação será transformada em células competentes de *E. coli* BL21(DE3) as quais serão plaqueadas em meio LB. As colônias formadas serão testadas para verificar se possuem uma cópia funcional dos genes selk e seltryp. As construções transformadas em células competentes de *E. coli* serão testadas para a expressão do gene de interesse por indução piloto (5ml). Lisados celulares destas culturas serão testados para a presença das SelK e SelTryp de *T. brucei* recombinantes por eletroforese em SDS-PAGE. Estas selenoproteínas estão sendo investigadas com a finalidade de determinar sua função no organismo.

Palavras-chave: Selenocisteína. Elemento SECIS. *Trypanossoma brucei*.

Referências

- 1 PAPP, L. V. Selenium to Selenoproteins: synthesis, identity and their role in human health. **Antioxidants & Redox Signaling**, v. 9, n. 7, p. 775-806, 2007.
- 2 COPELAND, P. R.; FLETCHER, J. E.; CARLSON, B. A.; HATFIELD, D. L.; DRISCOLL, D. M. A novel RNA binding protein, SBP2, is required for the translational of mammalian selenoprotein mRNAs. **The EMBO Journal**, v. 19, n. 2, p. 306-314, 2000. DOI:10.1093/emboj/19.2.306.

IC-34A - Expressão, purificação e cristalização dos receptores ativados da proliferação de peroxissomos

ZENATTI, Letícia¹; SANTOS, Jad米尔son Celestino¹; POLIKARPOV, Igor¹

leticiazenatti@usp.br

¹ Instituto de física de São Carlos - IFSC - Universidade de São Paulo – USP

Os PPARs, Receptores Ativados da Proliferação de Peroxisomos, fazem parte da superfamília dos receptores nucleares e são classificados em três diferentes isotipos: PPAR α , PPAR β/δ e PPAR γ (1). Estes receptores funcionam como importantes sinalizadores intracelulares que, juntamente com co-reguladores atuam como fatores de transcrição e regulam a expressão de genes específicos (2) relacionados à diversas funções do organismo, tais como: divisão celular, homeostase da glicose (diabetes do tipo 2), metabolismo de lipídeos, inflamação entre outras (3). Diversos agonistas endógenos já foram identificados para os PPARs, incluindo o 15-deoxi- Δ 12,14- Prostaglandina J2, prostaciclina e alguns ácidos graxos(4). Neste projeto de pesquisa objetivamos expressar, purificar e cristalizar os três diferentes isotipos de PPARs com diversos ligantes, sejam eles de origem natural ou sintética. Após a obtenção dos plasmídios com nossos colaboradores, estes foram transformados em células competentes *Escherichia coli* BL21 (DE3). Uma colônia foi selecionada e crescida em meio LB mais kanamicina e induzidas com 1mm IPTG (D.O. 0,6-1,0). Os meios foram centrifugados e o pellet de bactérias ressuspensido com tampão adequado para cada isotipo, as bactérias foram lisadas enzimaticamente, por meio de lisozima e fisicamente, através de ciclos de sonicação. A fração solúvel de cada isotipo foi separada para os passos seguintes da purificação. No primeiro passo da purificação utilizou-se a cromatografia de afinidade realizada em coluna de cobalto. Já no segundo passo, separou-se as proteínas de acordo com seu peso molecular (gel filtração). Os três isotipos foram então purificadas com alto rendimento.

Palavras-chave: Receptores nucleares. PPARs. Purificação de proteínas.

Referências

- 1 TAVARES, V.; HIRATA, M. H.; HIRATA, D. C. H. Receptor ativado por proliferadores de peroxissoma gama (PPAR γ): estudo molecular na homeostase da glicose, metabolismo de lipídeos e abordagem terapêutica. *Arquivos Brasileiros de Endocrinologia e Metabologia*, v. 51, n. 4, p. 526-533, 2007.
- 2 RENAUD, J. P.; MORAS, D. Structural studies on nuclear receptors. *Cellular and Molecular Life Science*, v. 57, n. 2, p. 1748-69, 2000.
- 3 FRANCIS, G. A.; FAYARD, E.; PICARD, F.; AUWERX, J. Nuclear receptors and the control of metabolism. *Annual Review of Physiology*, v. 65, p. 261-311, 2003.
- 4 VAMECQ, J. ; LATRUFFE, N. Medical significance of peroxisome proliferator-activated receptors. *The Lancet*, v. 354, n. 9173, p. 141-148, 1999.

IC-35A - Estudo do fármaco antineoplásico tiotepa

PEPINO, Rebeka de Oliveira¹

rebeka@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos - Universidade de São Paulo

Os insumos farmacêuticos ativos (IFAs) podem apresentar numerosas formas sólidas, as quais possuem diferentes propriedades físico-químicas, que podem comprometer a eficácia do medicamento em que ele é inserido. Portanto é fundamental conhecer suas características (1). Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo estudar as características de estado sólido do fármaco antineoplásico tiotepa, por meio da técnica de difração de raios X por monocristal. A tiotepa trata-se de um agente alquilante trifuncional, cuja atividade deve-se à presença de anéis aziridina altamente tensos e reativos. Esse fármaco apresenta estrutura química passível de sofrer diversas reações de quebra, sendo facilmente hidrolisado, além de apresentar baixo ponto de fusão (52°C) e embora seja comercializada em sua forma cristalina, para que fossem obtidos cristais apropriados à técnica, foi feita a sua recristalização em hexano (2). A coleta de dados foi realizada em um difratômetro Enraf-Nonius Kappa CCD e a forma cristalina obtida mostrou-se similar à única forma publicada, a qual cristaliza no grupo espacial monoclínico, P21/c, com quatro moléculas por unidade assimétrica. Porém, a estrutura reportada possui resolução de 16% contra 2,9% da estrutura a 100K obtida nesse trabalho. Com a qual, foi possível avaliar as interações presentes no empacotamento cristalino, que em 1969 não haviam sido relatadas, a maioria delas são não clássicas do tipo C-H \cdots N, formando dímeros, e geram um empacotamento cristalino de baixa densidade, com as moléculas constituindo cadeias ao longo do eixo c (3). Com esses novos dados concluiu-se que muito da instabilidade do composto, pode ser consequência destas interações, portanto, pretende-se obter novas formas para esse composto que possam melhorar sua estabilidade ao formar interações mais intensas.

Palavras-chave: Tiotepa. Cristalografia. Difração de raios X.

Referências

- 1 HILFIKE, R. **Polymorphism in the pharmaceutical industry.** Weinheim, Wiley-VCH, 2006. 433 p.
- 2 MAANEN M. J.; SMEETS C. J.; BEIJNEN, J. H. Chemistry, pharmacology and pharmacokinetics of N,N',N. **Cancer Treatment Reviews**, v. 26, n. 4, p. 257-268, 2000.
- 3 SUBRAMIAN, E.; TROTTER, J. Crystal structure of triethylenethiophosphoramide. **Journal of the Chemical Society A**, p.2309-2312, Jan.1969.DOI: 10.1039/J19690002309.

IC-36A - Estudos QSAR 3D - CoMFA de uma série de derivados imidazol-dioxolano com potente atividade anti-malária

MULINARI, Evandro José¹, ANDRICOPULO, A.¹

mulinari_evan@hotmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O *Plasmodium falciparum* é o agente etiológico da forma mais severa da malária que afeta milhões de pessoas no mundo, especialmente em regiões mais pobres, sendo o problema agravado pelo surgimento de casos de resistência aos fármacos disponíveis para o controle e tratamento. Nesse cenário, torna-se de extrema importância o planejamento e desenvolvimento de novos agentes quimioterápicos mais eficazes para o tratamento da malária. Os derivados imidazol-dioxolano apresentam significativa atividade inibitória em cultura de *P. falciparum*. Nesse trabalho, estudos das relações quantitativas tridimensionais entre a estrutura e atividade (QSAR 3D) foram conduzidos, empregando-se o método de análise comparativa de campos moleculares (CoMFA). A propriedade biológica considerada foi a potência de inibição, expressa pelo valor de IC₅₀ (concentração de inibidor necessária para reduzir em 50% a taxa de crescimento de culturas de *P. falciparum*). Os valores de IC₅₀ foram convertidos em pIC₅₀ (-log IC₅₀) e empregados como variável dependente na modelagem de QSAR 3D - CoMFA. O melhor modelo apresentou parâmetros estatísticos significativos ($r^2 = 0,95$; $q^2 = 0,64$). A estabilidade (validação interna) do melhor modelo foi avaliada aplicando-se os métodos leave-one-out (LOO) e leave-many-out (LMO) com 5 e 10 grupos de moléculas (LMO5 e LMO10, respectivamente). O processo de validação indica que o modelo apresenta alta estabilidade e consistência interna ($q^{25} = 0,61$; $q^{210} = 0,63$) e possui, também, elevada capacidade de predição ($r^{2\text{pred}} = 0,72$). A análise dos campos moleculares CoMFA indicou que a presença de substituintes eletronegativos na posição 4 do substituinte tiofenil-dioxolano é favorável para a atividade inibitória. No estudo realizado, após as etapas de otimização, foi obtido um modelo CoMFA robusto que apresenta elevado poder de predição e parâmetros estatísticos bastante razoáveis, indicativos da qualidade do modelo construído. Esse modelo, combinado com síntese orgânica planejada e ensaios biológicos padronizados, é útil para o desenvolvimento de novos agentes antimaláricos.

Palavras-chave: QSAR. CoMFA. *Plasmodium falciparum*.

Referências

- 1 VLAHAKIS, J.Z. et al. Anti-plasmodium activity of imidazole-dioxolane compounds. *Bioorganic Medicinal Chemical Letters*, v.16, n.9, p.2396-2406, May 2006.
- 2 SNOW, R.W. et al. Global distribution of clinical episodes of *Plasmodium falciparum* malaria *Nature*, v.434, p.214-271, March 2005. DOI:10.1038/nature03342.

IC-37A - Diferença do efeito vascular em terapia fotodinâmica usando diferentes fotossensibilizadores

SILVA, L. V.¹; BUZZA, H. H.²; BAGNATO, V. S.³; KURACHI, C.⁴

lucastmbit@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A angiogênese é o nome dado ao fenômeno de formação de novos vasos sanguíneos e, portanto, se relaciona não só às funções normais do corpo, mas também a doenças como câncer, artrite reumatoide, psoríase e diabetes (1). Quando esse fenômeno ocorre de forma descontrolada, torna-se crítico e tem um papel importante na formação de tumores sólidos e metástases. No entanto, na ausência de vascularização do tumor há um fenômeno de dormência dessa massa tumoral, descrito por Folkman em 1971 (2). A membrana córioalantóica de ovos de galinha, conhecido como CAM (do inglês, ChorioAllantoic Membrane), é um modelo *in vivo* extremamente eficiente para o estudo de diferentes atividades no endotélio vascular (3, 4). Um tipo de terapia não convencional que pode ser explorada nesse modelo é a Terapia Fotodinâmica (PDT do inglês, Photodynamic Therapy), técnica que consiste na interação entre luz, uma substância fotossensibilizadora e a geração de oxigênio molecular. Quando há a iluminação apropriada do tecido fotossensibilizado, a molécula é excitada, gerando oxigênio singlete, um produto citotóxico que leva à morte celular (5). Esse projeto tem como objetivo avaliar o efeito vascular de diferentes fotossensibilizadores aplicando a técnica de terapia fotodinâmica, usando o modelo de CAM. Com isso, espera-se contribuir para o tratamento de doenças como o câncer e entender sua relação com o fenômeno de angiogênese. Com o auxílio da captura e processamento de imagens, podemos obter dados qualitativos e quantitativos em função do tempo pós-terapia e relacioná-los as características biofísicas e bioquímicas do fotossensibilizador e sua interação com o ambiente.

Palavras-chave: Angiogênese. Terapia fotodinâmica. Membrana córioalantóica.

Referências

- 1 FINGAR, V. H. Vascular effects of photodynamic therapy. **Journal of Clinical Laser Medicine & Surgery**, v.14, n.5, p323-328, 2009. doi:10.1089/clm.1996.14.323.
- 2 FOLKMAN, J. Tumor angiogenesis: therapeutic implications. **New England Journal of Medicine**, v.285, n.21, p.1182-6. 1971.
- 3 STEINER, R. Angiostatic activity of anticancer agents in the chick embryo chorioallantoic membrane (CHE-CAM) assay. **EXS.**, v. 61, p. 449-54, 1992.
- 4 CAROLYN A. STATON, et al. Current methods for assaying angiogenesis in vitro and in vivo. **International Journal of Experimental Pathology**, v.85, n.5, p. 233-248, 2004.
- 5 TRIESSCHEIJN, M., BAAS, P., SCHELLENBACH, J. H. M.; STEWART, F. A. Photodynamic



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

therapy in oncology. **Oncologist**, v.11, n.9, p.1034-1044, 2006. DOI: 10.1634/theoncologist.11-9-1034.

PG-1A - Uso de imagens de fluorescência para monitoramento da evolução do cancro cítrico

WETTERICH, Caio Bruno¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹

caiovtrich@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O Laboratório de Interações Atômicas (LIA) da USP de São Carlos e o Fundecitrus têm desenvolvido em conjunto um projeto para uso de espectroscopia no diagnóstico de Cancro Cítrico. Desenvolvemos um sistema de imagem de fluorescência, o qual permite resolução espacial bem como, espectral da amostra. A aplicação desta técnica no campo tem apresentado resultados interessantes em relação ao diagnóstico do cancro cítrico, permitindo afirmar que é possível implementar uma técnica baseada em imagens de fluorescência para detecção da doença em folhas de citros. Contudo havíamos trabalhado somente com amostras do campo que já apresentavam sintomas visíveis a olho nu de cancro cítrico, de forma que ainda não conhecíamos a capacidade do equipamento para detectar a doença em plantas assintomáticas. Utilizando o sistema desenvolvido coletamos imagens de fluorescência de folhas de mudas de citros inoculadas com a bactéria do cancro cítrico, *Xanthomonas axonopodis* pv. *citri*, durante o período de 10 semanas. A partir das imagens obtidas, foram realizados seus respectivos histogramas com o objetivo de verificar a evolução da doença através de parâmetros obtidos de um ajuste gaussiano. Entretanto, tais parâmetros não permitiu inferir nada sobre a evolução do cancro cítrico nas folhas. Aplicando o método PCA (Principal Component Analysis) para a análise dos histogramas, foi possível obter as principais componentes da matriz evolução da doença. Resultados preliminares nos mostram que as amostras contaminadas com diferentes graus de severidade da doença apresentam uma tendência de comportamento linear, mas sem uma sequencia definida conforme o aumento do período de contaminação das amostras. O fato de coletarmos imagens de fluorescência de amostras diferentes (descartáveis) ao longo das semanas é a hipótese mais provável para a ausência de um padrão definido da evolução da doença.

Palavras-chave: Imagem de fluorescência. Cancro cítrico. PCA.

Referências

- 1 LINS, E. C. C. C.; BELASQUE JUNIOR, J.; MARCASSA, L. G. Optical fiber laser induced fluorescence spectroscopy as a citrus canker diagnostic. *Applied Optics*, v. 49, n. 4, p. 663-667, 2010. DOI:10.1364/AO.49.000663.
- 2 BELASQUE JUNIOR, J.; GASPAROTO, M. C. G.; MARCASSA, L. G. Detection of mechanical and disease stresses in citrus plants by fluorescence spectroscopy. *Applied Optics*, v.47, n. 11, p. 1922-1926, 2008. DOI:10.1364/AO.47.001922.
- 3 WETTERICH, J.; BELASQUE JUNIOR, J.; MARCASSA, L. G. Fluorescence imaging spectroscopy applied to citrus diseases. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON PRECISION AGRICULTURE, ICPA, 10., 2010, Denver, USA. *Proceedings...* Denver, USA: ICPA, 2010.

PG-2A - Explorando os diagramas de fase de não-equilíbrio de um novo modelo invariante conforme

OLIVEIRA, Caio Martins Ramos de¹; ALCARAZ, Francisco Castilho¹

caio.outmatched@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este estudo foca no entendimento das propriedades de um novo modelo, definido no espaço dos caminhos de Dyck que é um tipo especial de perfil "restricted solid-on-solid" (RSOS). O novo modelo chamado "peak adjusted raise and peel model" (PARPM) é uma extensão do já conhecido modelo "raise and peel model" (RPM). O modelo RPM é definido por uma dinâmica estocástica na qual partículas que compõem um gás rarefeito atingem uma interface líquida. Na colisão com a interface, tais partículas podem ser absorvidas localmente gerando uma nova configuração ou ainda promover uma mudança não local do perfil mediante a dessorção de maneira não local das partículas agregadas à superfície do perfil. Este modelo exibe a interessante propriedade de invariância conforme espaço-temporal. Isto ocorre no ponto especial em que a razão u das taxas de absorção pela de dessorção é igual a unidade. O novo modelo (PARPM) difere do modelo (RPM) pelo fato de possuir um parâmetro p adicional, que pode ser ajustado. Este parâmetro influencia na probabilidade de uma partícula atingir um pico: quanto maior este valor, maior a probabilidade de um pico ser acertado. Foi observado, contrariando as expectativas, de que este modelo possui invariância conforme para qualquer valor de p quando o valor de u é igual a um, a não ser para seu valor máximo ($p=2$), no qual o substrato se torna um estado absorvente (se torna o estado estacionário). Esta surpresa despertou a curiosidade em estudar o comportamento do modelo PARPM em diversas regiões do diagrama de fases de não equilíbrio do modelo no espaço de parâmetro $u-p$. Este será o objetivo de nosso trabalho. Tal estudo será feito mediante diagonalização exata do operador evolução do modelo (Hamiltoniano) para cadeias de tamanho pequeno (de até 30 sítios) e por simulações de Monte Carlo para cadeias de até centenas de milhares de sítios. O comportamento do modelo na região onde aparecerá o estado absorvente também será analisado.

Palavras-chave: Invariância conforme. PARPM. RPM.

Referências

1 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. A conformal invariant growth model. **Journal of Statistical Mechanics**, p. 12032, Dec. 2010. DOI: 10.1088/1742-5468/2010/12/P12032.

PG-3A - Avalanches no modelo de Kinouchi-Copelli

VALENCIA, Camilo Akimushkin¹; MAIA, Leonardo Paulo¹; MOSQUEIRO, Thiago Schiavo¹
camilo.akimushkin@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Em psicofísica, denomina-se intervalo dinâmico o conjunto das intensidades de estímulo que podem ser discriminadas por um sistema sensorial, no sentido que variações dinâmicas nos estímulos induzem respostas claramente distinguíveis. Embora os aspectos estruturais e os padrões de atividade nas redes neurais onde ocorrem esses processos sejam desconhecidos, observa-se que tais sistemas exibem amplos intervalos dinâmicos, englobando várias ordens de magnitude. Por outro lado, experimentos recentes têm revelado algumas propriedades das cascatas de atividade neuronal, mediante a determinação das suas durações e do número de neurônios envolvidos ("tamanho" da cascata). Em particular, observam-se cascatas com tamanhos distribuídos segundo leis de potência, que são denominadas avalanches. Osame Kinouchi e Mauro Copelli conceberam um modelo de dinâmica neuronal que exibe um intervalo dinâmico ótimo (máxima largura) como resultante do comportamento coletivo da rede neural perto de um ponto crítico. Entretanto, as características das cascatas de atividade naquele modelo permaneciam desconhecidas. Mediante simulações, mostramos que, na condição de criticalidade, o modelo de Kinouchi-Copelli exibe avalanches no tamanho e tempo das cascatas de atividade neuronal, com expoentes (nas leis de potência) $-3/2$ e -2 , respectivamente, de acordo com observações experimentais.

Palavras-chave: Redes neurais. Avalanches. Modelo de Kinouchi-Copelli.

Referências

- 1 KINOUCHI, O.; COPELLI, M. Optimal dynamical range of excitable networks at criticality. *Nature Physics*, v. 2, p. 348-351, 2006. DOI:10.1038/nphys289.
- 2 BEGGS, J. M.; PLENZ, D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. *Journal of Neuroscience*, v. 23, n. 35, p. 11167-11177, 2003.

PG-3B - Avalanches in the Kinouchi-Copelli model

VALENCIA, Camilo Akimushkin¹; MAIA, Leonardo Paulo¹; MOSQUEIRO, Thiago Schiavo¹
camilo.akimushkin@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

In psychophysics it is denominated dynamic range to the interval of stimulus intensities distinguishable by a sensory system in the sense that dynamic variations on stimuli induce clearly different responses. Even though the structural aspects and the activity patterns of neural networks where these processes happen are unknown, it is observed that those systems exhibit wide dynamic ranges spanning several orders of magnitude. On the other hand, recent experiments revealed some properties of neuronal activity cascades through measurements of its time duration and the number of neurons involved (size of the cascade). Particularly cascades with sizes distributed according to a power law, called avalanches, were observed. Osame Kinouchi and Mauro Copelli conceived a model for neuronal dynamics exhibiting an optimal dynamic range (maximum length) due to a collective behaviour of the neural network near a critical point. Up to now cascade activity features of the model were unknown. Through simulations we show that, at criticality, Kinouchi-Copelli model presents avalanches on time and size of neuronal activity cascades with the power law exponents -3/2 and -2 respectively and in accordance to experimental observations.

Keywords: Neural networks. Avalanches. Kinouchi-Copelli model.

References

- 1 KINOUCHI, O.; COPELLI, M. Optimal dynamical range of excitable networks at criticality. **Nature Physics**, v. 2, p. 348-351, 2006. DOI:10.1038/nphys289.
- 2 BEGGS, J. M.; PLENZ, D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. **Journal of Neuroscience**, v. 23, n. 35, p. 11167-11177, 2003.

PG-4A - Litografia quântica

MAXIMO, Carlos Eduardo¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

carloseduardo@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Pretendemos, neste Projeto, analisar as potencialidades da utilização de um Stern-Gerlach óptico (SGO) modificado para a realização de litografia atômica. O SGO modificado compreende um arranjo de duas cavidades, ao invés da cavidade única do SGO original (1), dispostas de forma que seus eixos sejam transversais. Fazendo, então, com que um feixe atômico atravesse as cavidades, perpendicularmente a seus eixos, devemos considerar a interação ressonante desses átomos com dois modos idênticos, cada qual de uma cavidade. Dessa forma, devemos esperar que os átomos adquiram momentos transversais à direção de propagação, direcionados ao longo do plano definido pelos eixos de ambas as cavidades. A litografia atômica deve resultar do possível controle da direção de deflexão dos átomos através da preparação de estados específicos dos modos das cavidades. Como extensão deste trabalho devemos também considerar uma cavidade anelar, o que deve oferecer um controle muito maior da direção de espalhamento dos átomos.

Palavras-chave: Litografia quântica. Interação radiação-matéria. Cavidades ópticas.

Referências

- 1 FREYBERGER, M.; HERKOMMER, A. M. Probing a quantum state via atomic deflection. **Physical Review Letters**, v. 72, n. 13, p. 1952-1955, 1994.

PG-5A - Aspectos termodinâmicos da gravitação semiclássica

LIMA, Cesar Augustus Uliana¹; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla¹

uliana@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Durantes os anos 60 Roger Penrose provou que era possível extrair energia (trabalho) de um buraco negro não-estático (1) e subsequentemente Stephen Hawking mostrou que tal processo nunca reduz a área total do horizonte de eventos do buraco negro (2). Paralelamente considerou-se que a existência de um buraco negro permitia uma aparente violação da segunda lei da termodinâmica pois podemos diminuir a entropia a depositando dentro de tal objeto. Para conciliar esses fatos com Jacob Bekenstein postulou que a área de um buraco negro seria proporcional a sua entropia (3) e Hawking mostrou a robustez dessa analogia ao demonstrar que campos quânticos na presença de gravitação clássica implica que buracos negros possuem temperatura não-nula (4). Assim na década de 70 se propôs um conjunto de leis da mecânica dos buracos negros análoga às leis da termodinâmica. Essa correspondência foi extrapolada por Ted Jacobson em 1995 quando propôs derivar as equações de Einstein, ou seja as relações da dinâmica gravitacional, através das leis da termodinâmica e do princípio de equivalência (5), de modo que a dinâmica da relatividade geral não seria necessariamente fundamental mas sim um fenômeno emergente da termodinâmica usual. Pretendemos explorar as propriedades termodinâmicas de espaçotempos no contexto da relatividade geral e sua conexão com a dinâmica gravitacional.

Palavras-chave: Gravitação. Termodinâmica. Buraco negro.

Referências

- 1 PENROSE, R. Gravitational collapse: the role of general relativity **Rivista del Nuovo Cimento**, Bologna, v.1, p. 252-276, 1969. Numero speziale.
- 2 HAWKING, S. W.; PENROSE, R. The singularities of gravitational collapse and cosmology **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: mathematical and physical sciences**, v. 314, n. 1519, p. 529-548, 1970. DOI: 10.1098/rspa.1970.0021.
- 3 BEKENSTEIN, J. D. Generalized second law of thermodynamics in black-hole physics **Physical Review D**, New York, v. 9, n. 12, p. 3292-3300, 1974.
- 4 HAWKING, S. W. Particle creation by black-holes **Communications in Mathematical Physics**, v. 46, n. 2, p. 206, 1976. DOI: 10.1007/BF01608497.
- 5 JACOBSON, T. Thermodynamics of spacetime: the Einstein equations of states **Physical Review Letters**, New York, v. 75, n. 7, p. 1260-1263, 1995.

PG-5B - Thermodynamical aspects of semiclassical gravitation

LIMA, Cesar Augustus Uliana¹; VANZELLA, Daniel Augusto Turolla¹
uliana@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

In the 60s Roger Penrose demonstrated the existence of a process such that energy(work) could be extracted from a non-static black-hole (1) and later Stephen Hawking proved that in this process the area of the event horizon is non-decreasing. Meanwhile the existence of black-holes seemed to be in contradiction with the second law of thermodynamics as one could lower the entropy of the universe by throwing it inside a black-hole (2). Seeking a conciliation between these facts Jacob Bekenstein proposed that the entropy of a black-hole is proportional to its area (3) and Hawking proved that a black-hole possess a temperature as well due to the interaction from quantum fields with the background spacetime (4). The thermodynamical properties of the black-hole had been so founded in the 70s. In order to explain this correspondence Ted Jacobson put forward a proposition to derive the Einstein Equations, the dynamical laws of gravitation, from a thermodynamics and the equivalence principle (5), proposing that gravitation is not fundamental but an emergent phenomenon. We seek to explore the thermodynamical properties of general spacetimes in the context of general relativity and the possible connection with gravitational dynamics.

Keywords: Gravitation. Thermodynamics. Black-hole.

References

- 1 PENROSE, R. Gravitational collapse: the role of general relativity **Rivista del Nuovo Cimento**, Bologna, v. 1, p. 252-276, 1969. Numero speciale.
- 2 HAWKING, S. W.; PENROSE, R. The singularities of gravitational collapse and cosmology **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: mathematical and physical sciences**, v. 314, n. 1519, p. 529-548, 1970. DOI: 10.1098/rspa.1970.0021.
- 3 BEKENSTEIN, J. D. Generalized second law of thermodynamics in black-hole physics **Physical Review D**, New York, v. 9, n. 12, p. 3292-3300, 1974.
- 4 HAWKING, S. W. Particle creation by black-holes **Communications in Mathematical Physics**, v. 46, n. 2, p. 206, 1976. DOI: 10.1007/BF01608497.
- 5 JACOBSON, T. Thermodynamics of spacetime: the Einstein equations of states **Physical Review Letters**, New York, v. 75, n. 7, p. 1260-1263, 1995.

PG-6A - Desenvolvimento de um novo sistema de aquisição para experimentos em condensados de Bose-Einstein

CASTELO BRANCO, Cora¹; MUNIZ, Sérgio Ricardo¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador
coracb@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nos nossos últimos experimentos, nós estudamos algumas consequências da natureza superfluida de um Condensado de Bose-Einstein. Utilizando uma excitação oscilatória introduzida através de campos magnéticos, nós apresentamos uma nova técnica para gerar vórtices (1). Recentemente, demonstramos que esta técnica é útil também para produzir um estado de turbulência quântica no BEC (1). Além da geração de vórtices existe outra possível maneira de induzir o estado de turbulência que seria o counter flow (fluxo de corrente contrário entre a nuvem térmica e a parte condensada dos átomos), fenômeno que estamos procurando também investigar. A primeira parte deste trabalho é modificar o sistema de imagem para melhorar a atual resolução e magnificação da nuvem. A segunda, construir um sistema de aquisição de imagem por contraste de fase (1), diferente do que está já em uso que é por absorção. Essas duas mudanças são para melhorar o nosso sistema de aquisição de forma a obtermos uma melhor definição das imagens que propicia uma melhor análise dos fenômenos.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Imagem por absorção. Imagem por contraste de fase.

Referências

1 HENN, E. A. L. et al. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618-1-043618-5, 2009.

PG-7A - Isolantes topológicos: conceitos básicos

CANDIDO, Denis R.¹; PENTEADO, Poliana H.¹; EGUES, J. Carlos¹
denisricardocandido@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Isolantes topológicos constituem uma nova classe de materiais que se comportam ao mesmo tempo como metais e isolantes. Mais especificamente, os estados de superfície ou de borda ('edge states') no caso 2D, destes sistemas são distribuídos continuamente, i.e., não apresentam gap de energia como os metais, e os estados em bandas ocupadas e vazias no seu interior (bulk) são separados por um gap como em isolantes ordinários. Como parte inicial do projeto de mestrado a ser desenvolvido nesta área, revisamos cálculos relevantes envolvendo a estrutura de bandas do isolante topológico constituído pelo poço quântico CdTe/HgTe/CdTe (1). Basicamente aplicamos o método k.p, generalizado para incluir heterointerfaces com simetrias distintas, para determinar o espectro de energia do sistema e as autofunções correspondentes, em particular dos estados de superfície [Poliana H. Penteado, Paolo Michetti, Patrik Recher, J. Carlos Egues - trabalho em preparação]. Este projeto é financiado pelo CNPq.

Palavras-chave: Isolantes topológicos. Estados de superfície. Método kp.

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.

PG-8A - Estrutura eletrônica de sistemas hexagonais via o método k.p.

PIRES, Diego Paiva¹; BERNARDES, Esmerindo de Sousa¹

diegopaiva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O método k.p. tem sido amplamente utilizado para determinar a estrutura eletrônica de materiais semicondutores (1, 2). Além de fornecer resultados analíticos, requer apenas uma pequena quantidade de parâmetros experimentais. Neste contexto, a equação de Schrödinger para um elétron na presença do potencial periódico de uma estrutura semicondutora, sujeito ainda a um acoplamento spin-órbita, quando reescrita para a parte periódica da função de Bloch, apresenta um termo proporcional ao produto escalar que atribui o nome ao método. Este, por sua vez, consiste na projeção desta nova hamiltoniana na base de autoestados que diagonaliza o termo de interação spin-órbita num ponto da rede. Conhecendo o grupo de simetria do material, dispomos de informações teóricas e experimentais prévias acerca dessa base, escolhida a priori tendo 8 autoestados. Esta escolha é tal que os elementos de matriz resultantes da projeção acoplam bandas de condução e valência, formando uma matriz 8x8 conhecida como matriz de Kane. Os elementos não nulos por argumentos de simetria são dados em termos de parâmetros experimentais (parâmetros de Kane). Em resultados recentes abordando o modelo de Kane para sistemas cúbicos, em especial redes Zincblende (3- 5), hamiltonianas efetivas são calculadas por meio do procedimento conhecido como Folding Down (3-5), seguido de um processo de linearização até segunda ordem no inverso do gap de energia com a devida correção na normalização do espinor da banda de condução (5). Motivados por estes trabalhos, neste projeto estamos construindo hamiltonianas efetivas para a sub-banda de condução em materiais de estrutura hexagonal, em particular Wurtzita, onde o acoplamento spin-órbita é estudado em detalhes. Como resultados parciais, destacamos a forma peculiar da interação spin-órbita e a presença de massas efetivas estritamente dependentes de spin que não ocorrem em sistemas cúbicos. É importante ressaltar ainda que dispomos de um tratamento comum aos sistemas cúbico e hexagonal, o que pode ser importante para politipismos.

Palavras-chave: Spintrônica. Método k.p. Estruturas hexagonais.

Referências

- 1 ENDERLEIN, R.; HORING, N. J. M. **Fundamentals of semiconductor physics and devices**. New Jersey: World Scientific, 1997.
- 2 WINKLER, R. **Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems**. Berlin: Springer Verlag, 2003. (Springer tracts in modern physics, v. 191).
- 3 CALSAVERINI, R. S. P. A. **Acoplamento spin-órbita inter-subbanda em heteroestruturas semicondutoras**. 2007. 97 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

4 CALSAVERINI, R. S.; BERNARDES, E.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. **Physical Review B**, v. 78, n. 5, p. 155313-1-155313-16, 2008.

5 MOSQUEIRO, T. S. **Transições ópticas em heteroestruturas semicondutoras zincblende com duas subbandas.** 2011. 160 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

PG-9A - Transporte dependente de spin através de um potencial delta de Dirac acoplado a uma coordenada harmônica

PENHA, F. C.¹; ROETHLISBERGER, Beat²; LOSS, Daniel²; EGUES, J. Carlos¹

felipecpenha@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Department of Physics - University of Basel

Consideramos uma heteroestrutura composta por duas camadas de um mesmo semicondutor e entre estas uma fina camada com impurezas magnéticas. Tal sistema é modelado como um potencial delta de Dirac, em que a interação *s-d* entre os elétrons de condução e aqueles no orbital $3d^5$ das impurezas magnéticas (1, 2) dá origem à dependência de spin do potencial. Incluindo o acoplamento da delta com uma coordenada harmônica, obtemos modos de transmissão inelásticos, os quais são abertos individualmente para energias múltiplas de $\hbar\omega$. Devido à conservação de probabilidade, a abertura de cada novo canal corresponde a um bico em cada uma das demais curvas de modo mais baixo da probabilidade de transmissão versus a energia de incidência (3). Adicionalmente, mostramos que o aumento dos processos de spin-flip torna o potencial efetivo atrativo. Este efeito dá origem a ressonâncias de Fano, para energias de incidência nas proximidades das energias de estado ligado (4); as quais levam a uma inversão abrupta da polarização. Através do formalismo de Landauer, que nos dá a conexão entre as probabilidades de transmissão e a média temporal da corrente elétrica (5), mostramos que a dependência de spin é refletida como um sinal de corrente maior para spin down. No entanto, o cálculo do fator de Fano (6) demonstra que as flutuações da corrente de elétrons carregando spin up são maiores em comparação com sua média. Este trabalho é apoiado por: Swiss NSF, NCCR Nanoscience, DARPA, FAPESP, CAPES, CNPq e Pró-reitoria de Graduação da Universidade de São Paulo.

Palavras-chave: Spintrônica. Semicondutores magnéticos. Transporte dependente de spin.

Referências

- 1 EGUES, J. C. Spin-dependent perpendicular magnetotransport through a tunable ZnSe/Zn_{1-x}Mn_xSe heterostructure: a possible spin filter? **Physical Review Letters**, v. 80, n. 20, p. 4578-4581, 1998.
- 2 EGUES, J. C.; WILKINS, J. W. Spin-dependent phenomena in digital-magnetic heterostructures: clustering and phase-space filling effects **Physical Review B**, v. 58, n. 24, p. R16 012-R16 015, 1998.
- 3 GELFAND, B. Y. et al. Tunneling in the presence of phonons: a solvable model. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 14, p. 1683-1686, 1989.

4 CAI, W. et al. Resonance of the one-dimensional electron transmission above a quantum well with dissipation. **Physical Review B**, v. 41, n. 6, p. 3513-3516, 1990.

5 BLANTER, Y. M.; BÜTTIKKER, M. Shot noise in mesoscopic conductors. **Physics Reports**, v. 336, n. 1-2, p. 1-166, 2000.

6 BEENAKKER, C.; SCHÖNENBERGER, C. Quantum shot noise. **Physics Today**, p. 37-42, May 2003. Disponível em: <http://lorentz.leidenuniv.nl/beenakkr/mesoscopics/topics/noise/physics_today_2003.pdf>. Acesso em: 09 Sept. 2011.

PG-10A - Caracterização de uma armadilha magneto óptica de sódio

VIVANCO, Franklin Adán Julca¹; PAIVA, Rafael Rothganger de¹; PEÑAFIEL, Edwin Eduardo Pedrozo¹; MAGALHÃES, Kilvia Mayre Farias¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

franklinze@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Uma armadilha magneto óptica (MOT) de sódio é um poderoso meio para estudar processos de colisões frias (1), e os fenômenos produzidos quando este interage com a luz, como processos de transições cooperativas de dois fótons (2), e é uma etapa inicial na formação de Condensados de Bose Einstein, já que coleta e armazena um grande numero de átomos a temperaturas de aproximadamente $240 \mu\text{K}$ (3). Obter melhores amostras em armadilhas magneto ópticas (MOT) é de vital importância em sistemas de átomos frios, pois a obtenção de parâmetros mais robustos na densidade dos átomos no MOT e o numero de átomos aprisionados, permitira um melhor estudo dos processos de colisão. Um MOT de sódio tipicamente contem um número de átomos $\sim 10^8$ no intervalo de temperaturas que vão desde os $100 \mu\text{m} - 1000 \mu\text{m}$ com densidades típicas maiores que 10^9 átomos/ cm^3 (3). Neste trabalho tratamos da caracterização de uma armadilha magneto óptica de átomos de sódio. Caracterizamos parâmetros como o fluxo de átomos provenientes do forno, o numero de átomos desacelerados, e o numero de átomos aprisionados finalmente na armadilha. Em nosso experimento, obtivemos densidades da ordem de 10^{12} átomos/ cm^3 , números de átomos da ordem de 10^{10} . Para isso fizemos melhorias no forno e no sistema de desaceleração (Zeeman Slower). Um MOT com estes parâmetros característicos esta sendo usado em experimentos de colisões frias e processos de dois fótons.

Palavras-chave: Armadilha magneto óptica. Colisões frias. Óptica atômica

Referências:

1 PAIVA, R. R. **Investigação do processo de foto-ionização associativa em situações com baixa dimensão.** 2009. 70 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

2 PEÑAFIEL, E. E. P. **Absorção cooperativa de dois fótons em átomos frios.** 2011. 84 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

3 NAIK, D. S. **Bose-Einstein condensation:** building the testbeds to study superfluidity. 2006. 212 p. Ph. D. Thesis (Philosophy) - School of Physics, Georgia Institute of Technology, Georgia, 2006

PG-10B - Characterization of a magneto optical trap of sodium

VIVANCO, Franklin Adán Julca¹; PAIVA, Rafael Rothganger de¹; PEÑAFIEL, Edwin Eduardo Pedrozo¹; MAGALHÃES, Kilia Mayre Farias¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
franklinze@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A magneto optical trap (MOT) of sodium is a powerful tool to study cold collisions processes (1), phenomena's interact with light, processes of cooperative two-photon transitions (2), and is a initial step for the formation of Bose Einstein condensates (BEC), since it collects and stores a large number of atoms to temperatures of approximately $240 \mu\text{K}$ (3). The achievement of best samples in MOT's is very important in systems of cold atoms, since obtaining more robust parameters in the density of atoms in the MOT and the number of trapped atoms, allowing a better study of collision processes. A MOT of sodium typically contains a number of atoms in order of $\sim 10^8$ in the range of temperatures from $100 \mu\text{m} - 1000 \mu\text{m}$ with densities typically greater than 10^9 atoms/cm^3 (3). In this work we present the characterization of a MOT for sodium atoms. We characterize parameters like the flow of atoms coming from the oven, the number of atoms slowed, and the number of trapped atoms in the trap finally. In our experiment, we obtained densities of the order of $10^{12} \text{ átomos/cm}^3$, and numbers of atoms in the order of 10^{10} . For this, we made improvements in the oven and the deceleration system (Zeeman Slower). A MOT with these characteristic parameters is being used in experiments on cold collisions and two-photon processes.

Keywords: Magneto optical trap. Cold collisions. Atom optics.

References:

- 1 PAIVA, R. R. **Investigação do processo de foto-ionização associativa em situações com baixa dimensão.** 2009. 70 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.
- 2 PEÑAFIEL, E. E. P. **Absorção cooperativa de dois fótons em átomos frios.** 2011. 84 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.
- 3 NAIK, D. S. **Bose-Einstein condensation:** building the testbeds to study superfluidity. 2006. 212 p. Ph. D. Thesis (Philosophy) - School of Physics, Georgia Institute of Technology, Georgia, 2006

PG-11A - Ferromagnetismo itinerante em sistemas unidimensionais

SILVEIRA, Hudson Pimenta¹; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves¹

hudpsa@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Renova-se o interesse em ferromagnetismo itinerante devido à observação de transições ferromagnéticas induzidas por interação em sistemas de átomos frios (1). Um teorema de Lieb e de Mattis (2) proíbe um estado fundamental ferromagnético para vários modelos unidimensionais, mas o teorema não se aplica a modelos de rede com hopping além de primeiros vizinhos. Gostaríamos de investigar a transição ferromagnética e as propriedades da fase ferromagnética usando uma abordagem de teoria de campo para modelos como o proposto por Tasaki (3), que é ferromagnético para interações repulsivas suficientemente fortes.

Palavras-chave: Ferromagnetismo itinerante. Líquido de Luttinger. Bosonização.

Referências

1 YANG, K. Ferromagnetic transition in one-dimensional itinerant electron systems **Physical Review Letters**, v. 93, n. 6, p. 066401, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.066401.

2 LIEB, E.; MATTIS, D. Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels **Physical Review**, v. 125, n. 1, p. 164-172, 1962.

3 TASAKI, H. Ferromagnetism in Hubbard models **Physical Review Letters**, v. 75, n. 25, p. 4678-4681, 1995.

PG-11B - Itinerant ferromagnetism in one-dimensional systems

SILVEIRA, Hudson Pimenta¹; PEREIRA, Rodrigo Gonçalves¹

hudpsa@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

There has been renewed interest in itinerant ferromagnetism due to observation of a interaction-induced ferromagnetic (FM) transition in cold atoms systems (1). A theorem due to Lieb and Mattis (2) rules out a FM ground state for a number of one-dimensional models, but the theorem does not hold for lattice models with hopping beyond nearest neighbour. We would like to investigate the FM transition and the properties of the FM phase using a field theory approach for models like the one proposed by Tasaki (3), which is known to exhibit ferromagnetism for strong enough repulsive interactions.

Keywords: Itinerant ferromagnetism. Luttinger liquid. Bosonization.

Referências

- 1 YANG, K. Ferromagnetic transition in one-dimensional itinerant electron systems **Physical Review Letters**, v. 93, n. 6, p. 066401, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.066401.
- 2 LIEB, E.; MATTIS, D. Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels **Physical Review**, v. 125, n. 1, p. 164-172, 1962.
- 3 TASAKI, H. Ferromagnetism in Hubbard models **Physical Review Letters**, v. 75, n. 25, p. 4678-4681, 1995.

PG-12A - Desenvolvimento de metodologias de otimização de pulsos para estudos de informação quântica via RMN

SILVA, Isabela Almeida¹; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹; PINTO, Diogo O. Soares¹

isa.almeidasilva@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Embora a RMN tenha aparecido inicialmente como uma das principais técnicas para implementação experimental de protocolos quânticos, a técnica sofreu sérias críticas quando foi mostrado que não era possível produzir emaranhamento quântico utilizando sistemas de RMN em temperatura ambiente (1). Mais recentemente, com a demonstração que mesmo estados separáveis poderiam exibir correlações quânticas (quantificados através da discordia quântica) (2), as aplicações de RMN na área ganharam novo fôlego. Isto ocorre, porque a técnica apresenta características únicas, pois os spins nucleares constituem um sistema de mistura estatística com alto grau de interação com um ambiente térmico, em que existem somente correlações quânticas de estados separáveis e a robustez dessas correlações no ambiente térmico (3-5). No entanto, para que novos estudos neste sentido possam ser realizados, é necessário realizar alguns desenvolvimentos, como a implementação de um método eficiente para realizar engenharia de pulsos de RF para realização de operações quânticas e criação de estados quânticos. Na primeira parte deste trabalho pretendemos implementar o método para otimização de pulsos de RF baseado na técnica denominada “gradient ascent pulse engineering” (GRAPE) (6). Este método consiste em encontrar seqüências de múltiplos pulsos com configurações adequadas de amplitude e fase, que permitam a realização eficiente das operações lógicas desejadas. Isto envolve o entendimento do método, a adaptação dos algoritmos para os casos específicos e a escolha dos sistemas de spins a serem utilizados, juntamente com os testes experimentais. Na segunda parte do projeto, pretendemos implementar métodos para criação de estados específicos em sistemas de três spins 1/2 acoplados (sistemas de 3 qubits) e também núcleos quadrupolares de spin 3/2 (sistema de dois qubits), que permitam o monitoramento e estudo da robustez das correlações quânticas e/ou da proteção de estados quânticos.

Palavras-chave: Informação quântica. RMN. Engenharia de pulsos RF.

Referências

- 1 BRAUNSTEIN, S. L.; CAVES, C. M.; JOZSA, R.; LINDEN, N.; POPESCU, S.; SCHACK, R. Separability of very noisy mixed states and implications for NMR quantum computing **Physical Reviews Letters**, v. 83, n. 5, p. 1054-1057, 1999.
- 2 OLLIVIER, H.; ZUREK,W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Reviews Letters**, v. 88, n. 1, p. 017901-017905, 2001.
- 3 SOARES-PINTO, D. O.; CÉLERI, L. C.; AUCCAISE, R.; FANCHINI, F. F.; DEAZEVEDO, E. R.; MAZIERO, J.; BONAGAMBA, T. J.; SERRA, R. M. Nonclassical correlation in NMR quadrupolar systems. **Physical Review A**, v. 81, n. 6, p. 062118, 2010.

4 AUCCAISE, R.; MAZIERO, J.; CÉLERI, L. C.; SOARES-PINTO, D. O.; DEAZEVEDO, E. R.; BONAGAMBA, T. J; OLIVEIRA, I. S.; SARTHOUR, R. S.; SERRA, R. M. Experimentally witnessing the quantumness of correlations. **Physical Reviews Letters**, v. 107, n. 7, p. 070501-070505, 2011.

5 SOARES-PINTO, D. O.; MOUSA, M. H. Y.; MAZIERO, J.; DEAZEVEDO, E. R.; BONAGAMBA, T. J.; SERRA, R. M.; CÉLERI, L. C. Equivalence between Redfield and master equation approaches for a time-dependent quantum system and coherence control **Physical Review A**, v. 83, n. 6, p. 062336-062349, 2011.

6 KHANEJA, N.; REISS, T.; KEHLET, C.; SCHULTE-HERBRÜGGEN, T. H.; GLASER, S. J. Optimal control of coupled spin dynamics: design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms **Journal of Magnetic Resonance**, v. 172, n. 2, p. 296-305, 2005.

PG-13A - Imobilização da enzima glicose oxidase em filmes nanoestruturados para aplicação em biossensores: caracterização óptica, estrutural e eletroquímica

SANTOS, Jaciara Cássia de Carvalho¹; ZUCOLLOTTO, Valtencir¹

jaciaracassia@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Aplicações de nanomateriais em biossensores têm recebido muito interesse nos últimos anos (1). Entre os vários tipos de biossensores estudados, sensores de glicose têm recebido destaque devido a sua importância em diagnósticos clínicos (2). Apesar do grande avanço no monitoramento de glicose nas últimas décadas ainda há muitos desafios relacionados a um monitoramento de glicemia forte, estável e confiável (3). Este estudo descreve a fabricação de filmes layer-by-layer (LbL) obtidos a partir da enzima glicose oxidase (GOx) e dos polieletrólitos poli(amidoamina) de geração 5 (PG5) e o híbrido PG5 complexado a nanopartículas de ouro (PG5AuNp). As nanopartículas de ouro foram sintetizadas em meio aquoso usando o dendrímero PG5, HAuCL4 e ácido fórmico. O crescimento dos filmes foi monitorado por espectroscopias de UV-Vis e FTIR. As medidas de espectroscopia UV-Vis mostraram que a adsorção da GOx, nos sistemas PG5-GOx e PG5AuNp-GOx, é assintótica. A espectroscopia de CD forneceu informações sobre a estrutura secundária da GOx nos filmes LbL. As análises por voltametria cíclica revelam que filmes são estáveis em soluções aquosas. Em adição às caracterizações ópticas, estrutural e eletroquímica, os filmes LbL, depositados sobre substratos de vidro recoberto com óxido de índio (ITO), foram testados para a atuação em biossensores amperométricos de glicose. A biofuncionalidade da GOx e a viabilidade do método como biossensor foi demonstrada pelo aumento da corrente de redução em função das sucessivas adições de alíquotas de glicose à solução. O biosensor ITO-PG5-GOx com o melhor desempenho mostrou uma resposta linear na faixa de 3 a 11 mM com sensibilidade de 0.17 μ A/mM e limite de detecção 1.2 mM. O biosensor ITO-PG5AuNp-GOx com o melhor desempenho mostrou uma faixa de resposta linear de 0 a 8 mM com sensibilidade média de 0.084 μ A/mM e limite de detecção de 1.2 mM.

Palavras-chave: Layer-by-layer. Biossensores. Imobilização.

Referências

- 1 KAUSHIK, A. et al. Iron oxide nanoparticles-chitosan composite based glucose biosensor. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 24, n. 4, p. 676-683, 2008.
- 2 FERREIRA, M.; FIORITO, P. A.; OLIVEIRA, O. N.; CÓRDOBA DE TORRESI, S. I. Enzyme-mediated amperometric biosensors prepared with the Layer-by-Layer (LbL) adsorption technique. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 19, n. 12, p.1611-1615, 2004.
- 3 WANG, J. Glucose biosensors: 40 years of advances and challenges. **Electroanalysis**, v. 13, n. 12, p. 83-88, 2001.

PG-14A - Teoria quântica de correção de erros durante portas lógicas e medidas de síndrome de tempo finito

CASTRO, Leonardo Andreta de¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹

leonardo.castro@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Desde o início da teoria de computação quântica, sabe-se que a interação dos bits quânticos (qubits) com o ambiente externo é capaz de gerar erros no resultado do algoritmo. Uma das principais técnicas de combater tais erros é a teoria quântica de correção de erros, que consiste em codificar os qubits em estados lógicos, de forma a gerar uma redundância de informação que pode ser medida e usada para corrigir o estado do sistema. (1, 2) Este método, porém, é comumente estudado em condições ideais, nas quais os erros não ocorrem durante as portas lógicas e a medida de síndrome é instantânea. O objetivo deste trabalho é duplo: apresentar um método de correção de erros que ocorrem durante a aplicação de portas lógicas e considerar os efeitos do ruído externo e da duração finita nas medidas de síndrome. A primeira meta é alcançada considerando-se quais tipos de ruído não afetam o processo de correção e aplicando-se a porta lógica em passos temporais curtos quando o método de correção normal não é aplicável. A segunda parte consiste em modelar a medida de síndrome ruidosa através de uma equação de Lindblad ou a equação-mestra híbrida equivalente (3) e aplicá-la continuamente, de forma que o mero ato de observar protege o estado inicial.

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

Referências

- 1 SHOR, P. W. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. **Physical Review A**, College Park, v. 52, n. 4, p. R2493-R2496, 1995.
- 2 STEANE, A. Multiple-particle interference and quantum error correction. **Proceedings of the Royal Society A**, London, v. 452, n. 1958, p. 2551-2577, 1996.
- 3 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. D. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, College Park, v. 84, n. 2, 2011.

PG-14B - Quantum error-correction theory during logical gates and finite-time syndrome measurements

CASTRO, Leonardo Andreia de¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹

leonardo.castro@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Since the inception of quantum computing theory, it is known that the interaction of the quantum bits (qubits) with the external environment is capable of generating errors in the outcome of the algorithm. One of the main techniques for preventing such errors is quantum error correction, which consists of encoding the qubits in logical states, thus generating a redundancy of information that can be measured and used to correct the state of the system. (1, 2) This method, however, is usually studied under ideal conditions, where the errors do not occur during logical gates, and the syndrome measurement is instantaneous. The objective of this work is twofold: to present a method of correcting errors that occur during the application of quantum gates and to consider the effects of external noise and finite duration in the syndrome measurements. The first aim is achieved by considering which kinds of noise do not affect the process of correction, and by applying the gate in short time steps separated by correction procedures when the normal method is not practical. The second part consists of modeling the noisy syndrome measurement through a Lindblad equation or the equivalent hybrid master-equation (3) and applying it continuously, so that the mere act of measuring helps to protect the initial state of the system.

Keywords: Quantum information. Error correction theory. Finite-time measurements.

References

- 1 SHOR, P. W. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. **Physical Review A**, College Park, v. 52, n. 4, p. R2493-R2496, 1995.
- 2 STEANE, A. Multiple-particle interference and quantum error correction. **Proceedings of the Royal Society A**, London, v. 452, n. 1958, p. 2551-2577, 1996.
- 3 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. D. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, College Park, v. 84, n. 2, 2011.

PG-15A - Estudo das ressonâncias moleculares envolvendo estados nS em átomos de Rydberg aprisionados numa armadilha de dipolo de CO₂

GONÇALVES, L. F.¹; CABRAL, J. S.¹; KONDO, J. D.¹; MARCASSA, L. G.¹

luisfelipe@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A armadilha atômica mais simples, atualmente, é a armadilha magneto-óptica (AMO), cujo mecanismo de aprisionamento envolve um campo magnético estático e eletromagnético ressonante. Esta combinação permite criar um ambiente que refrigera e aprisiona átomos cujas velocidades iniciais sejam da ordem de 1K, à temperaturas da ordem de centenas de μK , densidades entre 10^{10} e 10^{12} átomos/cm³ e um total de átomos aprisionados entre 10^6 e 10^9 . Até o momento, nosso laboratório tem realizado experimentos envolvendo átomos de Rydberg em armadilhas magneto-óptica. Com ela fomos capazes de medir tempo de vida de vários estados com grande precisão (1); observar a importância do movimento atômico devido aos potenciais de ultralongo alcance (2) e mais recentemente entender a importância de efeito Stark AC e DC na formação de moléculas, envolvendo átomos de Rydberg através de ressonâncias moleculares, e na transferência de população entre estados atômicos (3, 4). Contudo, estes experimentos foram realizado num regime de densidade de átomos de Rydberg limitado pelo funcionamento da AMO. Neste projeto temos como objetivo estender o estudo destas ressonâncias em um novo regime de densidade, e para isso aprisionaremos os átomos em uma armadilha de dipolo de CO₂. Esta armadilha nos permitirá obter as densidades atômicas de átomos de Rydberg muito mais altas, da ordem de 4×10^{11} cm⁻³. Para isso estamos desenvolvendo um aparato completamente novo para nosso experimento, que consiste numa técnica de aprisionamento puramente óptica. Neste trabalho será apresentado o status atual da construção do sistema bem como alguns resultados preliminares de calibração da armadilha magneto-óptica.

Palavras-chave: Átomos de Rydberg. Armadilha de dipolo. Ressonâncias moleculares.

Referências

- 1 OLIVEIRA, A. L.; MANCINI, M. W.; BAGNATO, V. S.; MARCASSA, L. G. Measurement of Rydberg-state lifetimes using cold trapped atoms. **Physical Review A**, v. 65, n. 3, p. 031401R, 2002. DOI: 10.1103/PhysRevA.65.031401.
- 2 NASCIMENTO, V. A.; CALIRI, L. L.; SCHWETTMANN, A.; SHAFFER, J. P.; MARCASSA, L. G. Electric field effects in the excitation of cold Rydberg-atom pairs. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 21, p. 213201, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.213201.
- 3 CABRAL, J. S.; KONDO, J. M.; GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G.; BOOTH, D.; TALLANT, J.; SHAFFER, J. P. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, p. 093023, 2010. DOI: 10.1088/1367-2630/12/9/093023.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

4 TAKEKOSHI, T.; YEH, J. R.; KNIZE, R. J. Quasi-electrostatic trap for neutral atoms. **Optics Communications**, v. 114, n. 5-6, p. 421-424, 1995.

PG-16A - Condensado de Bose-Einstein de estrôncio em uma rede óptica

MIGUEZ, Maria Luiza¹; COURTEILLE, Philippe Wilhelm¹

maria.miguez@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Gases atômicos ultrafrios são objetos interessantes para o estudo de efeitos fundamentais, forças fracas e o impacto de fenômenos quânticos sobre sistemas macroscópicos. Por exemplo, abaixo de uma temperatura crítica eles sofrem uma transição de fase para um estado de movimento coletivo chamado condensado de Bose-Einstein. Nesse estado, um gás atômico está livre de todas as perturbações relacionadas ao movimento atômico, o que permite a detecção de efeitos e ainda de instabilidades devido ao recuo transmitido para a nuvem atômica por fôtons individuais injetados. Átomos de estrôncio são ideais para esses estudos, por causa da existência de uma transição atômica mais fina do que o deslocamento de frequência induzida por um só fôton. Isso permite evitar o espalhamento múltiplo e o aprisionamento de radiação. Por outro lado, a transição é suficientemente larga para se possível resfriar a nuvem com lasers usando uma armadilha magneto-óptica com boa eficiência até temperaturas em torno de 1 μK . O nosso maior interesse é chegar a uma melhor compreensão dos efeitos coletivos no espalhamento de fôtons em amostras atômicas desordenadas. Em quais circunstâncias podemos esperar espalhamento superradiante ou subrradiante? Qual é o papel das fronteiras da nuvem atômica; podemos observar ressonâncias de Mie? O que podemos esperar se jogarmos um feixe de luz em uma nuvem periodicamente ordenada por uma grade óptica; podemos observar bandas de frequências proibidas como em um cristal fotônico? Nesse projeto de mestrado será construir uma montagem experimental de condensação de Bose de um gás de estrôncio usando técnicas de resfriamento óptico e evaporativo e transferir o condensado para uma armadilha óptica dipolar ou para uma rede óptica. Nesta situação, as reações do condensado à luz incidente serão investigadas e comparadas com teorias recentemente desenvolvidas ou que ainda precisam ser desenvolvidas.

Palavras-chave: Armadilha óptica. Condensado de Bose-Einstein. Montagem experimental.

Referências

- 1 MARTINEZ DE ESCOBAR, Y. N.; MICKELESON, P. G.; YAN, M.; DESALVO, B. J.; NAGEL, S. B.; KILLIAN, T. C. Bose-Einstein condensation of Sr84. **Physical Review Letters**, College Park, v. 103, n. 20, p. 200402, Nov 2009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.200402.

PG-17A - Simulações computacionais da transmissão óptica em fendas de filmes constituídos por multicamadas metálicas via geração de SPP

SILVA, Otávio de Brito¹; FERRI, Fábio A.¹; RIVERA, Victor A. G.¹; OSORIO, Sérgio A. P.¹; BORGES, Ben Hur V.²; MAREGA JUNIOR, Euclides¹

otavio@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Engenharia Elétrica/EESC - Universidade de São Paulo

O acoplamento entre os elétrons livres presentes em superfícies que separam determinado condutor de um dielétrico, com a radiação eletromagnética incidente sobre as mesmas geram modos de oscilação denominados na literatura como Surface Plasmon Polariton (SPP). Com a geração desses modos foi possível medir a transmissão óptica em nanoestruturas, cujas dimensões eram consideravelmente menores quando comparadas ao comprimento de onda da luz incidente, fato que não era intuitivamente esperado, pois desafiava o limite de difração. Iniciou-se uma nova área de interação da luz com a matéria, a Plasmônica. Na última década os esforços para a fabricação e caracterização de dispositivos que tenham os modos SPP presentes em suas constituições aumentaram, dado que os mesmos são excelentes candidatos a substituir estruturas largamente empregadas na indústria eletrônica que possuem limitações quanto à diminuição de suas dimensões que ofereçam melhor desempenho associado à velocidade de processamento. O projeto de mestrado desenvolvido se constitui de simulações computacionais de filmes metálicos, mais especificamente de ouro (Au) e prata (Ag), formados por quatro camadas alternadas desses metais, depositados em vidro BK7, onde são incididos por duas fontes de luz laser de polarização TM (da sigla em inglês Transverse Magnetic), com comprimentos de onda distintos: de 633 nm e 488 nm. Nesses filmes foram feitas fendas com larguras diferentes. Nosso intuito é verificar a influência da largura na transmissão óptica nas configurações Au/Ag/Au/Ag (ouro como sendo a camada superior) e Ag/Au/Ag/Au (prata). Para incremento de análise também incluímos simulações feitas com filmes de única camada para cada metal, a fim de comparar as duas situações. Esperamos que com o filme de camadas mistas haja um aumento da transmissão, graças ao reforço dos modos presentes no interior da fenda que funciona como sendo uma cavidade óptica.

Palavras-chave: Plasmons polaritons. Multicamada metálica. Simulação computacional.

Referências

1 MAIER, S. A. **Plasmonics fundamentals and applications**. Berlin:Springer Verlag, 2007. 223 p.

2 EBBESEN, T. W.; LEZEC, H. J.; GHAEMI, H. F.; THIO, T.; WOLFF, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, v. 393, p. 667-669, 1998. DOI:10.1038/35570.

3 FERRI, F. A.; RIVERA, V. A. G.; OSÓRIO, S. P. A.; SILVA, O. B.; ZANATTA, A. R.; BORGES, B. H. V.; WEINER, J.; MAREGA JUNIOR , E. Influence of film thickness on the optical transmission through subwavelength single slits in metallic thin films. **Applied Optics**, v. 50, n. 31, p. G11-G16, Aug. 2011. DOI:10.1364/AO.50.000G11.

4 ZAKHARIAN, A. R.; MOLONEY, J. V.; MANSURIPUR, M. Surface plasmon polariton on metallic surfaces. **Optics Express**, v. 15, n. 1, p. 183-197, 2007.

5 DINIZ, L. O. **Modelagem de dispositivos ópticos em escala nanométrica**. 2010. 86 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.

PG-18A - Superradiância em amostras de átomos interagentes

MORIYA, Paulo Hisao¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

paulohisao@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O fenômeno da superradiância (1) é caracterizado por um processo de ordenamento das transições dos dipolos de átomos de dois níveis em amostras excitadas moderadamente densas, que decorre das correlações induzidas entre os momentos de dipolo das transições atômicas, desenvolvidas pela radiação coerente emitida pelos próprios átomos. O processo superradiante, que é iniciado a partir de um desordenamento total em $t=0$, atinge um valor máximo em um tempo $\tau=1/N$ gerando um pulso de radiação de intensidade seguindo a lei do sech² e com pico proporcional à N^2 , levando à um processo de relaxação dos dipolos e um equilíbrio desordenado. Neste trabalho, tratamos a interação de dois modos de uma cavidade, a e b, com um sistema de N átomos de dois níveis com as freqüências das transições atômicas estreitamente distribuídas no entorno do modo a, de forma que interajam ressonantemente com este modo e dispersivamente com o modo b, do qual estão distantes e que acopla os átomos entre si. Para obtermos como a lei do sech² é afetada, utilizamos o método de rotações não-lineares (2) para obtermos o hamiltoniano efetivo do sistema, com uma forma mais explícita da interação dipolar entre os átomos (3). Por fim, após escrevermos a equação mestra do sistema, seguimos (4), que utiliza a aproximação de campo médio e o método dos invariantes de Lewis-Riesenfeld para chegar à lei que rege o fenômeno superradiante.

Palavras-chave: Superradiância. Átomos interagentes. Hamiltonianos efetivos.

Referências

- 1 HAROCHE, S.; GROSS, M. Superradiance: an essay on the theory of collective spontaneous emission. **Physics Reports**, v. 93, n.5, p.301-396, 1982.
- 2 KLIMOV, A. B.; ROMERO, J. L.; DELGADO, J.; SÁNCHEZ-SOTO, L. L. Master equations for effective hamiltonians. **Journal of Optics B: quantum and semiclassical optics**, v. 5, n. 1, p. 34, 2003.
- 3 ZHENG, S. B.; GUO, G. C. Efficient scheme for two-atom entanglement and quantum information processing in cavity QED. **Physical Review Letters**, v. 85, n. 11, p 2932-2935, 2000.
- 4 MIZRAHI, 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.
- 5 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, 2005.

PG-19A - Sistema para estudo de excitações aleatórias em superfluidos atômicos

TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti¹; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo¹; TELLES, Gustavo Deczka¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; MAGALHAES, Kilvia Mayre Farias¹
pedro.ernesto.tavares@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A pesquisa do nosso grupo visa estudar os efeitos causados pela aplicação de campos externos em um condensado de Bose-Einstein (1, 2). O estudo de excitações externas por campos espacialmente randômicos mostraram uma riqueza de efeitos no condensado, como localização de Anderson (3). O foco desse trabalho é analisar o comportamento do condensado na presença de campos magnéticos temporalmente randômicos (4). Uma das experiências neste âmbito é a de investigar a geração de vórtices aplicando campos magnéticos randômicos tanto em freqüência quanto em amplitude para gerar as excitações. Esta aleatoriedade no potencial introduz uma componente importante de desordem que, por sua vez, deve se manifestar na nucleação dos vórtices, variando o número e a orientação dos vórtices conforme os parâmetros da excitação. Espera-se que em determinados níveis de desordem, ocorra formação de um superfluido quântico turbulento, com diversas características especiais. Uma das propriedades interessantes a serem investigadas será a perda da superfluidez quando no regime de turbulência quântica.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Potenciais randômicos. Turbulência quântica.

Referências

- 1 HENN, E. A. L. et al. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618, 2009.
- 2 ROATI, G. et al. Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate. **Nature**, v. 453, v. 7197, p. 895-898, 2008.
- 3 ALBERT, M. et al. Dipole oscillations of a Bose-Einstein condensate in the presence of defects and disorder. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 25, p. 250405, 2008.

PG-19B - System to study random excitations in atomic superfluids

TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti¹; SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo¹; TELLES, Gustavo Deczka¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; MAGALHAES, Kilvia Mayre Farias¹
pedro.ernesto.tavares@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Our research group has studied the effects caused by application of external fields in a Bose-Einstein condensate (1, 2). The study of excitation by external spatially random fields showed localization's effects in the condensate, as Anderson localization (3). The focus of this work is to analyze the behavior of the condensate in the presence of temporally random magnetic fields (4). One of experiments in this scope is to investigate the vortex generation applying random fields in frequency as amplitude to generate the excitation. This randomness in the potential introduces an important component of disorder which should manifest in the vortices nucleation and orientation according to the parameters of the excitation. It is expected that at certain levels of disorder occurring formation of a turbulent quantum superfluid with several special features. One of the interesting properties to be investigated will be the loss of superfluidity when the regime of quantum turbulence.

Keywords: Bose-Einstein condensate. Random potentials. Quantum turbulence.

References

- 1 HENN, E. A. L. et al. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618, 2009.
- 2 ROATI, G. et al. Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate. **Nature**, v. 453, v. 7197, p. 895-898, 2008.
- 3 ALBERT, M. et al. Dipole oscillations of a Bose-Einstein condensate in the presence of defects and disorder. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 25, p. 250405, 2008.

PG-20A - Sobre a termodinâmica do efeito de spin

SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹; BONAGAMBA, Tito José¹

pmsoares02@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A descoberta do efeito de eco de spin feita por Edwin Hahn impulsionou o desenvolvimento de técnicas de seqüência de pulsos em Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e pode ser considerada uma das maiores contribuições para RMN do século. Esse efeito consiste no realinhamento dos spins de uma amostra, e consequentemente um reaparecimento do sinal de RMN, após uma seqüência de dois pulsos de radiofreqüência (RF) onde, entre os mesmos, deixa-se o sistema físico evoluir livremente por um dado intervalo de tempo. Em outras palavras, após a aplicação de um único pulso de RF, o sinal de RMN decairá de maneira exponencial, desaparecendo em um tempo característico. Contudo, se um segundo pulso for aplicado depois da evolução livre do sistema, os spins serão refocalizados, ganhando a coerência de fase perdida, e o sinal de RMN aparecerá novamente (1). Esse reaparecimento do sinal é encarado como um comportamento não-termodinâmico em um sistema físico concreto (2, 3). Esse comportamento curioso nos trás algumas questões: Que mecanismo fez com que os spins recuperassem a fase perdida? Será que o efeito de eco de spin pode ser visto como um desafio a conceito de irreversibilidade? Esse efeito poderia ser interpretado como um demônio de Maxwell atuando no sistema para que o mesmo recupere a fase? O intuito desse projeto é estudar esse fenômeno e dar a ele uma interpretação do ponto de vista da teoria de informação quântica. Nossos questionamentos estão relacionados à interpretação do efeito utilizando a idéia de um demônio de Maxwell quântico, ou seja, uma entidade cuja forma de armazenar a memória sobre o evento ocorrido siga as regras da Mecânica Quântica (4). Esse método de abordar o problema em RMN nos permitirá avaliar o custo termodinâmico, via cálculo de entropia, da operação de refocalização dos spins, bem como discutir questões fundamentais em Termodinâmica tal como a reversibilidade/irreversibilidade de um sistema.

Palavras-chave: Informação quântica. Spin. Termodinâmica.

Referências

- 1 SLICHTER, C. P. **Principles of magnetic resonance**. 3rd ed. Berlim: Springer, 1996.
- 2 ANASTOPOULOS, C.; SAVVIDOU, N. Consistent thermodynamics for spin echoes. **Physical Review E**, v. 83, n. 2, p. 021118, Feb. 2011. DOI: 10.1103/PhysRevE.83.021118.
- 3 LLOYD, S. Quantum-mechanical Maxwell's demon. **Physical Review A**, v. 56, n. 5, p. 3374-3382, Nov. 1997. DOI: 10.1103/PhysRevA.56.3374.
- 4 DEL RIO, L.; ABERG, J.; RENNER, R.; DAHLSTEN, O.; VEDRAL, V. The thermodynamic meaning of negative entropy. **Nature**, v. 474, n. 7349, p. 61-63, June 2011. DOI: 10.1038/nature10123.

PG-21A - Controle coerente das bandas de emissão do ZnO utilizando algoritmo genético

MARTINS, Renato Juliano¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

rjulianomartins@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O óxido de zinco (ZnO) é um semicondutor de fácil obtenção, um forte candidato para dispositivos fotônicos. No presente trabalho iremos, através do algoritmo genético (GA) em conjunto com a manipulação da fase espectral de pulsos laser ultracurtos, controlar as bandas de emissão do ZnO; (i) banda de emissão do exciton (banda centrada em 400 nm) e (ii) banda de emissão de defeitos (centrada em 550 nm). O pulso de excitação utilizado possui uma largura temporal de 30 fs e, correspondentemente uma largura espectral de aproximadamente 50 nm. Este pulso interage com o cristal de ZnO através de absorção de dois e três fótons. Utilizando um modulador espacial de luz (SLM) podemos manipular a fase relativa entre fótons do pulso, de tal forma a favorecer o processo de excitação. O SLM utilizado é constituído de 640 elementos de cristal líquido, cada um deles podendo ser controlado através de uma tensão aplicada ao mesmo. Para controlar o processo de emissão, utilizamos um algoritmo evolutivo conhecido como algoritmo genético. A ideia principal do algoritmo genético baseia-se na teoria da evolução, onde criamos uma população inicial (indivíduos) e a partir desta geração evoluímos, cruzamos e mutamos os genes. Cada indivíduo consiste de uma determinada máscara de fase espectral imposta ao pulso através do SLM. Para realizar tal experimento utilizamos um laser de Ti:Safira em 780 nm, operando a uma taxa de repetição de 80 MHz no regime de modos travados (Mode-Locking). Resultados iniciais mostram um grande crescimento na razão entre as duas bandas.

Palavras-chave: Óxido de zinco. Controle coerente. Algoritmo genético.

Referências

- 1 VIVAS, M. G.; SHIH, T.; VOSS, T.; MAZUR, E.; MENDONÇA, C. R. Nonlinear spectra of ZnO: reverse saturable, two- and three-photon absorption. *Optics Express*, v. 18, n. 9, p. 9628-9633, 2010.

PG-22A - Efeitos de hibridização correlacionada no modelo de Anderson de uma impureza

VEIGA, Rodrigo Soares¹; LÍBERO, Valter Luiz¹

rodsveiga@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Sistemas quânticos com a presença de impurezas têm sido o foco de relevantes estudos ao longo dos anos. Em geral, são representados por um sistema pequeno (a impureza) com poucos graus de liberdade acoplado a um sistema maior (o meio ou banho) com muitos graus de liberdade, sendo que os dois subsistemas devem ser tratados quanticamente. Em especial, o Hamiltoniano introduzido por P. W. Anderson em 1961 é um dos modelos mais importantes em física da matéria consensada. Em seu formato tradicional, descreve essencialmente o acoplamento entre um nível localizado de energia, o qual representa a impureza, e um conjunto contínuo de estados, que representa um banho fermiônico, comumente uma banda de condução de um metal - esse acoplamento é definido por um termo de hibridização que promove a troca de partículas entre o nível localizado e o banho. Usualmente, a interação não depende do número de ocupação do nível localizado; no entanto, de modo a tornar o modelo apto a tratar situações mais realistas, adicionamos neste trabalho um termo de hibridização que depende explicitamente do número de ocupação do nível da impureza, o que introduz uma correlação adicional, além da usual, proveniente da repulsão coulombiana. O Grupo de Renormalização Numérico (GRN) tem se mostrado uma técnica eficiente para tratar níveis localizados acoplados a um contínuo. Como é um tratamento não perturbativo, o Hamiltoniano pode ser diagonalizado numericamente - mesmo com o termo adicional de hibridização correlacionada - possibilitando o cálculo da função de partição e, consequentemente, de propriedades termodinâmicas do modelo. Neste trabalho, apresentamos resultados do GRN para a contribuição da impureza à três delas: calor específico, suscetibilidade magnética e entropia; todas em função da temperatura, do nível de Fermi até o topo da banda de condução.

Palavras-chave: Modelo de Anderson. Grupo renormalização numérico. Hibridização correlacionada.

Referências

- 1 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. **Physical Review**, v. 124, n. 1, p. 41-53, 1961. DOI: 10.1103/PhysRev.124.41.
- 2 TSVELICK, A. M.; WIEGMANN, P. B. Exact results in the theory of magnetic alloys. **Advances in Physics**, Oxfordshire, v. 32, n. 4, p. 453-713, 1983. DOI: 10.1080/00018738300101581.
- 3 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys: static properties for the symmetric case. **Physical Review B**, v. 21, n. 3, p. 1003-1043, 1980. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.1003.

4 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. **Reviews of Modern Physics**, College Park, MD, v. 80, n. 2, p. 395-450, 2008. DOI: 10.1103/RevModPhys.80.395.

5 MACEDO JÚNIOR, L. A. **Modelo de Anderson de uma impureza:** um caso elementar de sistema eletrônico correlacionado. 1998. 87 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1998.

PG-23A - Fabricação de microestruturas dopadas com nanowires de ZnO e microestruturas birrefringentes por fotopolimerização por absorção de dois fóton

RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca¹; GOMES, Vinicius Tribuzi R. P.¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

rubenfonseca@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nos últimos anos, a demanda por microdispositivos mais complexos aumentou o desenvolvimento de novas técnicas de microfabricação. Técnicas convencionais apresentam limitações como, por exemplo, o fato de que elas são essencialmente bidimensionais. A fotopolimerização por absorção de dois fótons é uma ferramenta poderosa para a fabricação de estruturas tridimensionais, com dimensões variando de micro para nanômetros, em diversas aplicações, tais como circuitos ópticos, armazenamento de dados ópticos, estruturas birrefringentes e cristais fotônicos. A dopagem de microestruturas é extremamente importante para permitir a fabricação de dispositivos com características específicas, que podem ser explorados para o desenvolvimento de aplicações em óptica, fotônica e biologia. No presente trabalho, produzimos microestruturas através da técnica de fotopolimerização por absorção de dois fóton. As microfabricações foram realizadas em resinas acrílicas dopadas com nanowires de ZnO, que apresentam fluorescência quando excitadas com luz em 325 nm. Quando dopadas com o cromóforo azoaromático Hema DR13 (1% em peso), elas podem apresentar a birrefringência ópticamente induzida. A fotopolimerização por absorção de 2 fótons foi realizada com um oscilador laser de Ti:safira, que produz pulsos de 130 fs em 800 nm. A amostra é varrida no plano xy pelo feixe laser através de um conjunto de espelhos galvanométricos. O movimento na direção z é realizado por um estágio de translação. O feixe laser é focalizado na amostra utilizando uma objetiva de abertura numérica 0,65, com uma potência média de 40 mW. A polimerização é visualizada através de uma câmera CCD. Até o momento implantamos o sistema de fabricação, e demos início aos testes para a fabricação das microestruturas dopadas.

Palavras-chave: Fotopolimerização (2PP). Cromóforo azoaromático. Nanowires de ZnO.

Referências

- 1 MENDONÇA, C. R. Reversible birefringence in microstructures fabricated by two-photon absorption polymerization. **Journal of Applied Physics**, v. 102, n. 1, p. 013109-1-013109-2, 2007. DOI: 10.1063/1.2752113.
- 2 MARUO, S.; NAKAMURA, O.; KAWATA, S. Three-dimensional microfabrication with two-photonabsorbed photopolymerization. **Optics Letters**, v. 22, n. 2, p. 132-134, 1997. DOI: 10.1364/OL.22.000132.

PG-24A - Tratamento exato da interação sistema-reservatório e não-Markovianidade no regime de acoplamento forte

BATALHÃO, Tiago Barbin¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef²

tiago.batalhao@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Apresentamos um tratamento exato da interação sistema-reservatório. Consideramos um modo bosônico como nosso sistema de interesse, interagindo com um conjunto de outros modos bosônicos, inicialmente no estado de vácuo. Mostramos que a solução exata é a solução de uma equação mestra com coeficientes dependentes do tempo, que são calculados em termos dos parâmetros do reservatório. Observamos que, para acoplamento suficientemente forte, que nosso método permite tratar, ocorre comportamento não-Markoviano, caracterizados por um valor negativo do acoplamento efetivo na equação mestra, significando que a excitação pode retornar do reservatório para o sistema.

Palavras-chave: Dissipação e decoerência. Equação mestra. Não-Markovianidade.

Referências

1 VACCHINI, B.; BREUER, H. P. Exact master equations for the non-Markovian decay of a qubit. **Physical Review A**, v. 81, n. 4, p. 042103, 2010. DOI: 10.1103/PhysRevA.81.042103.

2 BREUER, H. P.; LAINE, E. M.; PILO, J. Measure for the degree of non-Markovian behavior of quantum processes in open systems. **Physical Review Letters**, v. 103, p. 210401, 2009. DOI:10.1103/PhysRevLett.103.210401.

PG-24B - Exact treatment of the system-reservoir interaction and non-Markovianity in the strong coupling regime

BATALHÃO, Tiago Barbin¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef²

tiago.batalhao@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

We present an exact treatment of the system-reservoir interaction. We consider one bosonic mode as our system of interest, interacting with a set of other bosonic modes, initially in their vacuum states. The exact solution is shown to be a solution to a master equation with time-dependent coefficients, which we calculate in terms of the reservoir parameters. We verify that, for sufficiently strong coupling, which our method allows us to deal with, there is non-Markovian behaviour, which is characterized by a negative value of the effective coupling rate in the master equation, meaning that excitation is flowing from the reservoir back to the system.

Keywords: Dissipation and decoherence. Master equation. Non-Markovianity.

References

- 1 VACCHINI, B.; BREUER, H. P. Exact master equations for the non-Markovian decay of a qubit. **Physical Review A**, v. 81, n. 4, p. 042103, 2010. DOI: 10.1103/PhysRevA.81.042103.
- 2 BREUER, H. P.; LAINE, E. M.; PIILO, J. Measure for the degree of non-Markovian behavior of quantum processes in open systems. **Physical Review Letters**, v. 103, p. 210401, 2009. DOI:10.1103/PhysRevLett.103.210401.

PG-25A - Engenharia de reservatórios em redes de cavidades preenchidas por amostras atômicas

MERCADO, Wilson Enrique Rosado¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

we.rosado@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Pretendemos neste Projeto aplicar o programa da engenharia de reservatórios às redes de cavidades preenchidas por amostras atômicas e, possivelmente, à teoria do laser. No primeiro caso, pretendemos estender o programa da engenharia de reservatórios para a proteção de estados emaranhados (1, 2) envolvendo sistemas espacialmente separados, como amostras atômicas ou polaritons localizados em diferentes cavidades da rede. Além da proteção de estados emaranhados de sistemas mesoscópicos, devemos analisar a implementação de processos como a transferência de estados do campo, dos átomos (3), ou de suas combinações ---os polaritons--- entre cavidades distintas, perseguindo, via engenharia de reservatórios, a maximização das de suas fidelidades. Objetivamos também analisar a possibilidade de se aplicar a engenharia de reservatórios para a manipulação das propriedades da radiação laser. Posto que a engenharia de reservatórios consiste em submeter o sistema de interesse a interações auxiliares que acarretam a modificação da estrutura do operador Liouvilliano associado aos efeitos do reservatório, pretendemos submeter o meio ativo do laser a diferentes interações com campos de radiação adicionais e analisar suas consequências.

Palavras-chave: Engenharia de reservatórios. Proteção de estados emaranhado. Transferência de estados.

Referências

- 1 CARVALHO, A. R. R.; MILMAN, P.; MATOS FILHO, R. L.; DAVIDOVICH, L. Decoherence, pointer engineering, and quantum state protection. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 22, p. 4988–4991, 2001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.4988.
- 2 PRADO, F. O.; DUZZIONI, E. I.; MOUSSA, M. H. Y.; ALMEIDA, N. G.; VILLAS-BOAS, C. J. Nonadiabatic coherent evolution of two-level systems under spontaneous decay. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 7, p. 073008, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.073008.
- 3 FEDER, D. L. Perfect quantum state transfer with spinor bosons on weighted graphs. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 18, p. 180502, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.180502.

PG-26A - Geração de segundo harmônico sintonizável por modulação de fase de pulsos ultracurtos

OLIVEIRA, Anderson Roberto de¹; SIQUEIRA, Jonathas Paula¹; ZILIO, Sérgio Carlos¹

anderson.roberto.oliveira@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O efeito da interação não linear da luz com a matéria pode ser controlado formatando-se campos elétricos para produzir interferência construtiva ou destrutiva entre componentes intrapulso durante a interação. Esse controle coerente da interação da luz com a matéria abre a possibilidade para aplicações como a microscopia seletiva por dois fótons, entre outras. A criação de uma forma de pulso específica pode ser realizada através da manipulação da fase e/ou a amplitude das componentes espectrais de um pulso de laser de femtosegundos usando formatadores de pulso de dispersão zero. O formatador de pulso mais comum usa um modulador espacial de luz baseado em cristal líquido (LC SLM). No presente trabalho mostramos a possibilidade de gerar luz sintonizável e de banda estreita mais fina que 1 nm em torno de 400 nm por duplicação de freqüência de pulsos de laser ultracurtos cuja fase espectral é modulada por uma soma de funções senoidais com diferentes freqüências. A idéia por trás desse esquema de modulação é que modulação aditiva de fase resulta em um produto de funções exponenciais, cada uma dando origem a uma função de Bessel de ordem zero na amplitude do segundo harmônico gerado. Com períodos e fases propriamente escolhidas, o produto dessas funções é aproximadamente zero, exceto em uma banda estreita. Esta banda pode ser continuamente sintonizada por todo o espectro, o que é uma característica importante para seletividade em microscopia por dois fótons e espectroscopia por um fóton na região UV. Um aspecto positivo do método de modulação de fase apresentado aqui é que ele se baseia em uma função analítica e não requer nenhum algoritmo evolucionário de aprendizagem complexo para produzir resultados razoavelmente bons.

Palavras-chave: Geração de segundo harmônico. Controle coerente. Pulsos ultracurtos.

Referências

- 1 PASTIRK, I.; DELA CRUZ, J. M.; WALOWICZ, K. A.; LOZOVOY, V. V.; DANTUS, M. Selective two-photon microscopy with shaped femtosecond pulses. **Optics Express**, Washington, DC, v. 11, n. 14, p. 1695-1701, 2003. DOI: 10.1364/OE.11.001695.
- 2 WEINER, A. M. Femtosecond pulse shaping using spatial light modulators. **Review of Scientific Instruments**, College Park, MD, v. 71, n. 5, p. 1929-1960, 2000. DOI: 10.1063/1.1150614.
- 3 HACKER, M.; NETZ, R.; ROTH, M.; STOBRAWA, G.; FEURER, T.; SAUERBREY, R. Frequency doubling of phase-modulated ultrashort laser pulses. **Applied Physics B**, v. 73, n. 3, p. 273-277, 2001. DOI: 10.1007/s003400100676.
- 4 BOYD, R. W. **Nonlinear Optics**. San Diego: Academic Press, 1992.

PG-27A - Gravação e caracterização de redes de Bragg em fibras ópticas

ORLANDI, André Orlandi de¹; MISOGUTI, Lino¹; ZILIO, Sérgio Carlos¹

andre.orlandi.oliveira@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Redes de Bragg (FBG, do inglês Fiber Bragg Grating) (1) têm revolucionado a área de telecomunicações e sensoriamento devido às suas propriedades quase ideais, como baixa atenuação óptica e baixa não-linearidade (2). Estas características fizeram com que as FBGs se tornassem importantes em diversas áreas, incluindo o sensoriamento de parâmetros físicos (3), particularmente temperatura e deformação (4). As informações fornecidas por esses sensores são baseadas na mudança espectral da luz refletida (ou transmitida) pela rede, alcançando uma medida absoluta em tempo real, as quais podem ser facilmente multiplexadas. Neste trabalho, foram utilizadas duas diferentes técnicas para a inscrição de redes de Bragg em fibras ópticas. Uma delas utiliza o espelho de Lloyd e permite um fácil ajuste da luz refletida (ou transmitida) pelas FBGs, apenas com pequenas mudanças do ângulo entre o espelho e o “feixe” do laser. A outra técnica é chamada point by point e é interessante por gerar as FBGs rapidamente. Neste caso, usa-se um laser infravermelho de femtosegundo com um tempo de repetição de aproximadamente 1 kHz. Cada pulso induz uma pequena mudança no índice de refração do núcleo da fibra. Uma vez que o comprimento de onda refletido pela rede de Bragg depende do seu período, a luz refletida tem um comprimento de onda diferente e seu período é alterado. Baseado nisto é possível medir mudanças de temperatura e deformação, uma vez que estes dois parâmetros físicos dilatam a fibra óptica, o que induz a variação do período nas FBGs. O objetivo deste trabalho é desenvolver um sistema de medida de temperatura e deformação de baixo custo e de alta precisão, discriminando o efeito causado por cada parâmetro.

Palavras-chave: FBG. Sensor. Temperatura e pressão.

Referências

- 1 OTHONOS, A., KALLI, K. **Fiber Bragg gratings**: fundamentals and applications in telecommunications and sensing. Boston: Artech House, 1999.
- 2 KASHYAP, R. **Fiber Bragg gratings**. San Diego: Academic Press, 1999.
- 3 FRAZAO, O.; FERREIRA, L. A.; ARAUJO, F. M.; SANTOS, J. L. Applications of fibre optic grating technology to multi-parameter measurement. **Fibre & Integrated Optics**, v. 24, n. 3-4, p. 227-244, 2005.
- 4 OTHONOS, A. Fiber Bragg gratings. **Reviews of Scientific Instruments**, v. 68, n. 12, p. 4309-4341, 1997.
- 5 MARTINEZ, A.; DUBOV, M.; KRUSHCHEV, I.; BENNION, I. Direct writing of fibre Bragg gratings by femtosecond laser. **Electronics Letters**, v. 40, n. 19, 1170-2 , 2004.

PG-28A - Montagem experimental para criar redes ópticas de estrôncio ultrafrio

SALAS, Andres Rodriguez¹; VOGEL, Dominik²; BENDER, Helmar¹

andresro@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Universitaet Tuebingen

O objetivo deste trabalho é resfriar átomos de estrôncio para confiná-los em uma rede óptica. Para obter átomos de estrôncio resfriados é necessário construir um forno onde o estrôncio sólido será aquecido até trazê-lo para o vapor de estrôncio a uma temperatura de 600°C. O feixe de átomos que vem do forno é colimado por 100 microtubos de diâmetro ~200μm em uma seção transversal total de 4 mm de diâmetro. Os átomos que passam pelos microtubos são iluminados transversalmente por quatro pares de feixes laser com orientações transversais à direção de propagação. O objetivo é de reduzir a divergência do feixe atômico, para minimizar a perda de átomos. O seguinte estágio é a implementação de um decelerador Zeeman, onde os átomos diminuem a velocidade devido a pressão radiativa induzida por um feixe laser contrapropagante, circularmente polarizado e com uma desintonização de -500MHz. O decelerador Zeeman consiste de um conjunto de bobinas criando um campo magnético em configuração spin flip. O campo magnético é destinado a induzir um deslocamento de frequência Zeeman dos níveis atômicos compensando o efeito Doppler devido a alta velocidade dos átomos. O campo magnético vai diminuindo ao longo do decelerador Zeeman para dar conta à velocidade decrescendo. Na câmara principal os átomos são aprisionados e resfriados por uma Armadilha Magneto-Óptica (AMO). O estrôncio tem uma transição forte entre os níveis 1S0-1P1 com um comprimento de onda 461nm usado para fazer uma AMO azul. Os átomos no estado excitado 1P1 decaem para o estado metaestável 3P2. Depois os átomos são bombeados para o estado 3P1, onde eles ficam aprisionados por uma armadilha magnética. Ligamos então uma segunda AMO na transição muito fina 1S0-3P1 com o comprimento de onda vermelho 689nm. Aqui os átomos podem alcançar temperaturas em torno de 4μK. Agora os átomos resfriados são carregados para de uma armadilha óptica dipolar em 1064nm e resfriados pelo método evaporativo até chegar ao ponto de condensação de Bose-Einstein (BEC). Por último os átomos são carregados em redes ópticas de diferentes geometrias. O nosso interesses principal consiste em estudar o espalhamento coletivo de luz em estruturas ordenadas como as redes ópticas.

Palavras-chave: Átomos frios. Condensação de Bose Einstein. Redes ópticas.

Referências

- 1 LUDLOW, A. D. **The strontium optical lattice clock:** optical spectroscopy with sub -Hertz accuracy. 2008. 251 p. Ph. D. Thesis (Philosophy) - Department of Physics, University of Colorado, Colorado, 2008.

2 BIDEL, Y. Piégeage et refroidissement laser du strontium étude de l'effet des interférences en diffusion multiple. 2002. 392 p. Ph. D. Thesis (Physique) - Laboratoire Ondes et Désordre, Université de Nice - Sophia Antipolis, Nice, 2002.

3 STELLMER, S.; KHOON TEY, M.; HUANG, B.; GRIMM, R.; SCHRECK, F. Bose-Einstein condensation of strontium. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 20, p. 200401-1-200401-4, 2009. DOI:10.1103/PhysRevLett.103.200401

4 MARTINEZ DE ESCOBAR, Y. N.; MICKELSON, P. G.; YAN, M.; DESALVO, B. J.; NAGEL, S. B.; KILLIAN, T. C. Bose-Einstein condensation of ^{84}Sr . **Physical Review Letters**, v. 103, n. 20, p. 200402-1-200402-4, 2009. DOI:10.1103/PhysRevLett.103.200402

5 BACHELARD, R.; PIOVELLA, N. P.; COURTELLE, P.W. Cooperative scattering and radiation pressure force in dense atomic clouds. **Physical Review A**, v. 84, p. 013821, 2011. DOI: 10.1103/PhysRevA.84.013821.

PG-29A - Sistemas ópticos para retinografia digital de alta resolução

LENACIONE, Diego¹; CASTRO NETO, Jarbas Caiado de¹; STEFANI, Mario Antonio²
diego.lencione@opto.com.br

¹ IFSC / Depto. de P&D Opto Eletrônica S. A. - Universidade de São Paulo

² Depto. de P&D Opto Eletrônica SA

Neste trabalho será apresentado o desenvolvimento do sistema óptico de um equipamento oftalmológico cuja finalidade é capturar imagens digitais do fundo do olho humano com alta resolução e que permita o diagnóstico preciso de doenças relacionadas com este tecido. A técnica de imageamento da retina se divide em dois grandes grupos: as retinografias e as angiografias. Dentre as retinografias, as principais são a colorida e a anerítra, também conhecida como red free. Já as angiografias envolvem a administração de contraste na corrente sanguínea do paciente para destaque da circulação. Os tipos mais comuns são com fluoresceína, FA, e com indocianina verde, ICG. Esses exames diferem no que diz respeito à característica espectral da iluminação da retina e também com relação ao fenômeno óptico envolvido. A retinografia colorida e a red free são caracterizadas por captar o reflexo e o espalhamento da luz nas camadas retinianas, enquanto que os exames FA e ICG são caracterizados pela captação da fluorescência do contraste presente no fundo do olho. São muitos os desafios ópticos que precisam ser superados para que seja possível fotografar a retina humana com alto nível de detalhamento. Entre eles pode-se destacar: necessidade de uma grande faixa de acromatização do sistema óptico de imageamento da retina, eliminação do reflexo que é gerado em conjuntos ópticos que são comuns e coaxiais com a iluminação da retina e ao seu imageamento, eliminação do reflexo gerado pela córnea (1), uso de um modelo de olho humano que seja representativo quanto às suas aberrações ópticas (2), mecanismos de ajuste de foco que permitam o imagedimento adequado para pacientes com diferentes dioptrias e conhecimento dos fenômenos de auto-fluorescência em todas as partes do olho humano (3). Este trabalho apresentará a abordagem utilizada para a otimização e análise do sistema assim como os resultados preliminares obtidos.

Palavras-chave: Instrumentos oftalmológicos. Imageamento da retina. Sistemas ópticos.

Referências

- 1 DEHOOG, E.; SCHWIEGERLING, J. Optimal parameters for retinal illumination and imaging in fundus cameras. **Applied Optics**, v. 47, n. 36, p. 6769-6777, Dec. 2008.
- 2 ESCUDERO-SANZ, I.; NAVARRO, R. Off-axis aberrations of a wide-angle schematic eye model. **Journal Optical Society of America**, v. 16, n. 8, p. 1881-1891, Aug. 1999.
- 3 ROVATI, L.; DOCCHIO, F. Autofluorescence methods in ophthalmology. **Journal of Biomedical Optics**, v. 9, n. 1, p. 9-21, Jan/Feb 2004.

PG-30A - Processamento de sinais da pressão intracraniana: um novo cenário

QUEIROZ, Diogo Rodrigues¹; VILELA, Gustavo Henrique Frigieri¹; CARDIM, Danilo Augusto²; MASCARENHAS,Sergio¹; TANNUS, Alberto¹

diogo.queiroz@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Ciências Fisiológicas - Universidade Federal de São Carlos

A pressão intracraniana (PIC) é a pressão exercida por estruturas cerebrais (tecido cerebral, líquido cefalorraquidiano e sangue) sobre as paredes do crânio. A PIC é um parâmetro muito importante para diagnósticos clínicos, resultados rápidos e monitoramento em tempo real são essenciais para evitar danos à saúde dos pacientes. Atualmente todos os métodos utilizados para medi-la são invasivos, sendo necessário introduzir um sensor no interior da caixa craniana, o que pode ocasionar lesões e infecção ao paciente. Como uma alternativa a este método foi desenvolvido pelo professor Sérgio Mascarenhas (IFSC-USP) um método Minimamente Invasivo (PICMI), onde um sensor de deformação mecânica é colado na parte externa do crânio para monitorar variações da tábua óssea craniana. Uma vez elaborada e consolidada a nova ferramenta, faz-se necessário estudar e trabalhar os sinais obtidos para facilitar o uso e leitura dos resultados. Neste trabalho analisaremos o sinal obtido pela PICMI (tensão em função do tempo) e faremos um tratamento matemático dos dados utilizando Transformada de Fourier a fim de decompor suas componentes para melhor aproveitamento dos resultados. Nos experimentos, aplicaremos o novo método à ratos Wistar expostos a uma variedade de situações. Para análise e tratamento dos dados, serão utilizados os programas MatLab e Origin. Uma vez obtida a PIC pelo método minimamente invasivo, pretendemos estudar outros parâmetros neurológicos importantes, como por exemplo o PRx (cerebrovascular pressure reactivity index, índice que relaciona PIC e Pressão Arterial), e compará-los aos resultados obtidos pelos métodos tradicionais. Além do sinal da PIC, obtivemos também outros sinais biológicos importantes, oriundos do sistema respiratório e cardíaco. Os resultados são bastante satisfatórios, a PICMI mostrou-se uma ferramenta muito útil, prática, barata e menos perigosa para os pacientes.

Palavras-chave: Pressao Intracraniana. PIC. PRx.

Referências

- 1 VILELA, G. H. F. **Desenvolvimento de um sistema minimamente invasivo para monitorar a pressão intracraniana.** 2010. 126p. Tese (Doutorado em Ciências - opção: Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 2 CZOSNYKA, M. et al. Continuous monitoring of cerebrovascular pressure reactivity in patients with head injury. **Neurosurgical Focus**, v. 25, n. 10, p. E2, Oct. 2008. DOI: 10.3171/FOC.2008.25.10.E2.
- 3 BALESTRERI, M. et al. Impact of intracranial pressure and cerebral perfusion pressure on severe disability and mortality after head injury. **Neurocritical Care**, v. 4, n. 1, p. 8–13, 2006.

PG-31A - Estudos de cerâmicas porosas via RMN

MONTRAZI, E. T.¹; D'EURIDYCE, M. N.¹; SOUZA, A. A.¹; OLIVEIRA-SILVA, R.¹; AMORIN, A. D. F.¹; VIDOTO, E. L. G.¹; FORTULAN, C. A.²; FONTES, S. R.²
elton.montrazi@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho envolve o estudo de meios porosos através da Ressonância Magnética Nuclear (RMN), com medidas de tempo de relaxação T2 de 1H de moléculas de água que se encontram confinadas. Para realização destes estudos foi desenvolvida a instrumentação necessária, que envolve a construção de um magneto resistivo e da sonda de RMN, cuja frequência de operação é de 2 MHz, padrão empregado nos estudos de rochas petrolíferas. As amostras estudadas foram as cerâmicas de alumina (Al_2O_3), cujo tamanhos dos poros são pré-determinados na sua confecção, possibilitando um melhor entendimento e caracterização das técnicas empregadas na porosimetria por RMN. Através da sequência de pulso de radiofrequência (RF) conhecida como CPMG, obtém-se a distribuição dos tempos de relaxação transversal T2 que estão relacionadas indiretamente com o tamanho dos poros.

Palavras-chave: RMN. Porosimetria. CPMG.

Referências

- 1 ABRAGAM, A. **Principles of nuclear magnetism.** Hong Kong: Oxford University Press, 1983, 599 p.
- 2 DUNN, K.-J.; BERGMAN, D. J.; LATORRACA, G. **Nuclear magnetic resonance – petrophysical and logging applications.** Inglaterra: Elsevier Science, 2002, 293 p. (Handbook of Geophysical Exploration, v. 32).
- 3 MEIBOOM, S.; GILL, D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times. **Review of Scientific Instruments,** v. 29, p. 688-691, 1958. DOI: 10.1063/1.1716296.

PG-32A - Geração de terceiro harmônico em meios isotrópicos usando a técnica de varredura-Z

BARBANO, Emerson Cristiano¹; ZILIO, Sérgio Carlos¹

emerson.barbano@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - IFSC - Universidade de São Paulo – USP

Os pulsos ultracurtos têm como importante característica as altas intensidades de pico, que permitem que, com seu uso, os processos ópticos não lineares se manifestem mais facilmente. Além disso, o seu uso vem crescendo devido à maior disponibilidade nos laboratórios de pesquisa. Neste trabalho, vamos apresentar alguns estudos que fizemos relativos ao processo de geração de terceiro harmônico (GTH) com laser de femtossegundos (fs). Nestes estudos, investigamos este fenômeno em mais detalhes a partir da técnica de varredura-Z, que nos permite determinar com maior precisão a influência de parâmetros do feixe como intensidade, cintura do feixe e parâmetro Rayleigh. Efeitos interessantes aparecem quando um feixe focalizado é aplicado na GTH. Por exemplo, na condição de forte focalização, temos a GTH influenciada pelo tipo de interface entre dois meios diferentes. Esse efeito é bastante interessante e sofre forte influência da fase de Gouy (1), que tem como principal manifestação o fato de que, quando o feixe laser é focalizado totalmente dentro da amostra continua (sem interface), o terceiro harmônico gerado antes do foco interfere destrutivamente com o terceiro harmônico gerado após o foco. Dessa forma, é possível observar a luz gerada apenas quando há uma quebra de simetria, condição que é satisfeita na interface entre dois meios diferentes. Nossos resultados mostram que o harmônico gerado na interface de entrada de um meio óptico difere do harmônico gerado na interface de saída, tanto na intensidade quanto no espectro. Para entendermos melhor este comportamento, medimos a GTH em diferentes materiais, com diferentes intensidades, polarizações e ângulos de incidência do feixe fundamental. Também medimos a GTH na interface entre dois vidros diferentes, assim como em cubetas com diferentes solventes. Acreditamos que a interpretação correta destes resultados trará contribuições importantes para um melhor entendimento do processo envolvido na GTH com pulsos ultracurtos.

Palavras-chave: Óptica não linear. Geração de terceiro harmônico. Varredura-Z.

Referências

1 GOUY, L. G. Sur une propriété nouvelle des ondes lumineuses **Comptes rendus de l'Académie des sciences**, v. 110, p. 1251-1253, 1890.

PG-33A - Dinâmica de Hegselmann-Krause em redes complexas

BATISTA, Joao Luiz Bunoro¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

joao.luiz.batista@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Fenômenos coletivos em redes sociais como formação de linguagem ou cultura, crenças, emergência de consenso em relação a algum assunto, aquisição de conhecimento e aprendizagem, dentre outros, tem conduzido a um grande interesse no estudo de comportamentos cooperativos e fenômenos sociais, resultando numa grande variedade de dinâmicas de opinião. Nestes modelos, uma população de agentes interagentes carrega uma variável (ou um conjunto delas) numérica cujo valor representa uma “opinião” (estado) sobre um tópico, com interpretações distintas em cada contexto. Inspirado em conceitos de mecânica estatística e mecanismos sociais, estes estados evoluem governados por regras matemáticas que controlam a dinâmica de interação entre os agentes e a influência de fatores externos. Por outro lado, como o comportamento microscópico real dos elementos é muito rico, o que impossibilita uma descrição simples e com poucos parâmetros, simplificações são tipicamente consideradas e consistem em agentes seguindo uma maioria local ou imitando um vizinho. Assim, partindo de um estado desordenado, o sistema pode se auto-organizar através de um processo de ordenamento levando a um consenso global, ou alternativamente pode alcançar um estado de polarização ou fragmentação. Outro importante ingrediente na modelagem de sistemas reais, é que a representação das interações difere bastante de reticulados ou misturas homogêneas, sendo mais bem descritas por redes complexas, e cujo efeito da estrutura é não trivial. Neste trabalho consideramos a dinâmica de opinião de Hegselmann e Krause. Neste modelo, agentes possuem opiniões que assumem valores contínuos e são atualizadas de acordo com a vizinhança compatível, definida pelo princípio da confiança limitada. Após apresentar uma revisão da literatura, mostramos os resultados da dinâmica para diferentes tipos de topologias, seguida de modificações do modelo que consideram a ação de efeitos externos, como a presença de ruído ou campo. Os resultados obtidos identificam a influência da distribuição de graus, de hubs e da interação em comunidades.

Palavras-chave: Dinâmicas de opinião. Confiança limitada. Redes complexas.

Referências

- 1 CASTELLANO, C.; FORTUNATO, S.; LORETO, V. Statistical physics of social dynamics. *Reviews of Modern Physics*, v. 81, n. 2, p. 591-646, 2009.
- 2 LORENZ, J. Continuous opinion dynamics under bounded confidence: a survey. *International Journal of Modern Physics C*, v. 18, n. 12, p. 1819-1838, 2007.

PG-34A - Diagnóstico de greening em citros utilizando técnicas fotônicas

CARDINALI, Marcelo Camponez do Brasil¹; VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro²; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira²

marcelo.cardinali@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Embrapa Instrumentação - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária

A laranja é uma das frutas mais produzidas e consumidas no mundo. O Brasil é o maior produtor e exportador de laranja do mundo, contribuindo com mais de 18 milhões de toneladas anuais, sendo aproximadamente 80% desta produção feita no estado de São Paulo (1). Pragas e doenças sempre estiveram presentes na citricultura mundial. Atualmente, a doença mais preocupante é o Greening, conhecida mundialmente como Huanglongbing (HLB). A doença não possui cura, apresenta longa fase assintomática e torna as plantas infectadas improdutivas ao longo do tempo (2). A transmissão da doença ocorre através de um inseto conhecido como Diaphorina citri, que adquire a bactéria se alimentando da seiva de árvores infectadas. O manejo realizado pelos produtores consiste no combate ao vetor, erradicação de árvores sintomáticas e aquisição de mudas certificadas saudáveis. Entretanto, a apresentação tardia dos sintomas, entre seis e doze meses e a baixa eficiência da inspeção visual dificultam a contenção da doença. A técnica PCR, usualmente utilizada para o diagnóstico da doença através da detecção da bactéria (3) é inviável por ser cara e trabalhosa. Neste trabalho, são propostos dois métodos para detecção de HLB em folhas de citros usando técnicas fotônicas: Fluorescência induzida por Laser (LIFS) e Infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Para a realização do trabalho, foram utilizadas folhas de árvores saudáveis, infectadas com HLB e infectadas com Clorose Variegada do Citrus (CVC). Os espectros obtidos com as técnicas foram pré-tratados para a indução de classificadores. Taxas de acerto superiores a 90% foram obtidas com as duas técnicas, sendo muito superior às taxas dos métodos empregados atualmente.

Palavras-chave: FTIR. LIFS. Greening.

Referências

1 INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATISTICA. **Levantamento sistemático da producao agrícola:** pesquisa mensal de previsão e acompanhamento das safras agrícolas no ano civil. Rio de Janeiro, 2011. 82p.

2 BOVÉ, J. M. Huanglongbing: a destructive, newly-emerging, century-old disease of citrus. **Journal of Plant Pathology**, v. 88, n. 1, p. 7–37, 2006.

3 TEIXEIRA, D. C. et al. Distribution and quantification of *Candidatus Liberibacter americanus*, agent of huanglongbing disease of citrus in São Paulo State, Brasil, in leaves of an affected sweet orange tree as determined by PCR. **Molecular and Cellular Probes** , v.22 , n. 3, p. 139–150, 2008.

PG-35A - Elementos de circuito equivalente para bicamadas SWNT/PAMAM em estruturas EIS

SOUZA, Marcos Antonio Moura de¹; SIQUEIRA JÚNIOR, José Roberto²; VERCIK, Andres³
marcos.moura.fis@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Ciências Exatas, Naturais e Educação - Universidade Federal do Triângulo Mineiro

³ Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos - Universidade de São Paulo

Dispositivos de efeito de campo são bastante ativos na indústria da microeletrônica e vem ganhando cada vez mais destaque na ciência e engenharia de sensores biológicos. A aplicação de sistemas derivados de capacitores MIS (Metal - Isolante - Semicondutor), como o EIS (Eletrólito - Isolante - Semicondutor), possuem a vantagem da integração de membranas íon seletivas que atuam diretamente como uma porta da estrutura EIS no lugar do metal no caso do capacitor MIS. Para facilitar o transporte iônico dos hidrogênios ionizados, oriundos das reações enzimáticas, nanoestruturas são incorporadas aos dispositivos. Neste trabalho são investigadas as propriedades elétricas das bicamadas de nanotubos de carbono (SWNT) e de dendrímeros (PAMAM) integradas em chips de silício dopado tipo P onde a camada dielétrica são óxidos de silício (SiO_2) e de tântalo (Ta_2O_5). A caracterização elétrica foi feita através de medidas de espectroscopia de impedância onde as curvas foram fitadas utilizando modelos de circuito equivalente encontrados na literatura para tais sistemas EIS (1). Também foram realizadas medidas em capacitores MIS, uma vez que entendendo os fenômenos relacionados a essas estruturas podemos ter uma compreensão melhor dos mecanismos de funcionamento dos capacitores EIS. No modelo de circuito equivalente observamos um decréscimo da capacitância relacionada com a carga espacial do semicondutor em função do acréscimo do número das bicamadas devido ao acúmulo de cargas positivas dessas bicamadas na superfície do óxido. Este fato nos leva a considerar que há uma maior adsorção efetiva das cargas do PAMAM (Ph 4) no óxido que as cargas dos SWNTs (Ph 8). O número de bicamadas no chip corrobora com a mobilidade do transporte dos íons, sendo constatado que o número para uma melhor mobilidade é de 3 bicamadas.

Palavras-chave: MIS. EIS. Nanotubos de carbono.

Referências

- 1 MACDONALD, J. R. **Impedance spectroscopy**: emphasizing solid materials and systems. New Jersey: John Wiley, 1987. 346 p.
- 2 SIQUEIRA JÚNIOR, J. R., et al. Penicillin biosensor based on a capacitive field-effect structure functionalized with a dendrimer/carbon nanotube multilayer. **Biosensors & Bioelectronics**, v. 25, n. 2, p. 497-501, Oct. 2009. DOI: 10.1016/j.bios.2009.07.007.

PG-36A - Construção de campos de luz para TFD intersticial

STRINGASCI, Mirian D.¹; MORIYAMA, Lilian T.¹; BAGNATO, Vanderelei S.¹; KURACHI, Cristina¹

mirianstringasci@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A terapia fotodinâmica (TFD) tem sido utilizada no tratamento de vários tipos de tumores, apresentando melhores resultados quando a lesão é superficial (1). A penetração da luz nos tecidos biológicos é um fator limitante na TFD e dificulta o tratamento de tumores sólidos ou invasivos, nestes casos, pode-se recorrer à TFD intersticial, em que fibras ópticas são inseridas no tumor. Fibras ópticas com difusores cilíndricos têm sido usadas para a aplicação da TFD intersticial, no entanto, as diferenças no perfil de emissão de luz a partir dos difusores dependendo do modo de fabricação, tamanho e propriedades, dificultam o estabelecimento da dosimetria de luz (2). Este trabalho tem por objetivo determinar a distribuição da luz gerada por um difusor cilíndro em um meio turbido. Para isto, uma solução de emulsão lipídica foi utilizada como phantom óptico. Uma fibra óptica com um difusor cilíndrico de 2 cm de comprimento foi acoplada a um laser de diodo em 630 nm e a distribuição de luz gerada pelo difusor foi medida através de uma fibra óptica de coleta. A partir da medida do campo de luz gerado por um elemento de 1mm de comprimento do difusor cilíndrico de 2 cm, deseja-se recuperar a distribuição de luz gerada por todo o difusor. Os resultados obtidos até o momento, mostram que é possível reconstruir o campo de luz de um elemento difusor cilíndrico de 2mm através de dois elementos de 1 mm. Os resultados mostraram ainda a necessidade de caracterizar o perfil de emissão de luz ao longo de todo o difusor cilíndrico, pois a luz emitida ao longo do difusor não é uniforme. A caracterização prévia do difusor permite levar em consideração as diferenças de intensidade de luz emitida ao longo e ao redor do difusor, permitindo que o campo reconstruído seja mais semelhando ao real.

Palavras-chave: TFD. Intersticial. Luz.

Referências

- 1 WILSON, B. C.; PATTERSON, M. S. The physics, biophysics and technology of photodynamic therapy. **Physics in Medicine and Biology**, v. 53, n. 9, p. R61, 2008. DOI: 10.1088/0031-9155/53/9/R01.
- 2 LOWDELL, C. P.; ASH, D. V. ; DRIVER, I.; BROWN, S. B. Interstitial photodynamic therapy. clinical experience with diffusing fibres in the treatment of cutaneous and subcutaneous tumours. **British Journal Cancer**, v. 67, p. 1398-1403, 1993.

PG-37A - Síntese e caracterização do sistema SrTi_{1-x}Fe_xO₃

PELISSARI, Pedro Ivo Batistel Galiote Brossi¹; SILVA, Luis Fernando da¹; BERNARDI, Maria Inês Basso¹; MASTELARO, Valmor Roberto¹

pedro.pelissari@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

As propriedades do Titanato de Estrôncio foram muito bem exploradas devido as suas diferentes aplicabilidades como ,por exemplo, um sensor de gás(1-3). A adição de impurezas aceitadoras ,na sua estrutura, modifica suas características estruturais e consequente mente suas propriedades físicas. Logo o controle do processo de dopagem do material é fundamental para otimizar as características de interesse(1-3). O objetivo deste trabalho é sintetizar e caracterizar os SrTi_{1-x}Fe_xO₃ (x=0,0; 0,025; 0,05; 0,075; 0,10; 0,15 e 0,25) verificando o efeito do ferro nas propriedades do material.O pó precursor foi feito pelo método dos precursores poliméricos modificado (3). O pó foi caracterizado pela análise termogravimétrica(TG) e pela análise térmica diferencial(DTA)das quais foram retiradas as temperaturas para total eliminação dos compostos orgânicos. Após o tratamento térmico o pó cristalino foi caracterizado por difração de raio-x(DRX) onde foi observada a presença da solução sólida SrTiO₃. Através da microscopia eletrônica de varredura (FEG-SEM) foi observado que com o aumento da quantidade de Fe aumenta a aglomeração das partículas. Filmes finos da mesma composição foram preparados com o pó cristalino pela técnica de deposição por feixe de elétrons (EBD). Foram depositados em substratos de silício amorfo, vidro, sílica e substratos de silício com eletrodos de Platina. Após a deposição os filmes são amorfos logo estes são submetidos ao tratamento térmico a 500°C por 4h00 para serem cristalizados. Os filmes finos foram caracterizados por difração de raio-x(DRX) onde foi encontrado a presença da solução sólida SrTiO₃. A caracterização ótica dos filmes foi feita utilizando-se a espectroscopia UV-VIS e a partir destes espectros foi calculado o gap ótico, o qual esta em acordo com a literatura. Imagens por microscopia de força atômica(AFM) foram feitas para verificar a mudança da morfologia do filme com a composição e o tratamento térmico.

Palavras-chave: Sensores. Filmes finos. Perovskitas.

Referências

- 1 SILVA, L. F. da. **Síntese e caracterização do composto SrTi_{1-x}Fe_xO₃.** 2009. 98p. Dissertação (Mestrado em Ciências e Engenharia de Materiais) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.
- 2 BAO, D.; YAO, X.; WAKLYA, N.; SHINOZAKI, K.; MIZUTANI, N. Band-gap energies of sol-gel-derived SrTiO₃ thin films. **Applied Physics Letters**, v. 79, n. 23, p. 3767, 2001.
- 3 HARA, T.; TAKASHI, I.; WAKLYA, N.; SHINOZAKI, K. Oxygen sensing properties of SrTiO₃ thin films. **Journal of Applied Physics**, v. 47,n. 9, p. 7486, 2008.

PG-38A - Síntese e caracterização de AgNPs conjugadas com peptídeos antimicrobianos

BERTÉ, Rodrigo¹; LEITE, José R. S. A.²

berete.rodrigo@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Núcleo de Pesquisa em Biodiversidade e Biotecnologia - Universidade Federal do Piauí

Nanopartículas de prata (AgNPs) têm reconhecida atividade antimicrobiana (1), e como recentemente descoberto, alguns peptídeos, isolados de uma variedade de organismos, demonstraram também tal efeito (2). Nesse projeto realizamos a síntese de AgNps, sua caracterização por técnicas espectroscópicas, tais qual o DLS, e conjugamos as mesmas com peptídeos antimicrobianos com reconhecida atividade contra bactérias, demonstrando sua ligação também por espectroscopia, usando técnicas como FTIRS e UV-vis. Após a síntese e caracterização desses nanocompósitos, iremos testar sua atividade contra bactérias que possuam resistência a diversas classes de antibióticos, conhecidas como bactérias multi-resistentes, dentre as quais a MRSA (*Staphylococcus aureus* multi-resistente).

Palavras-chave: Nanopartículas. Prata. Peptídeos.

Referências

1 KIM, J. S. et al. Antimicrobial effects of silver nanoparticles. **Nanomedicine**: nanotechnology, biology, and medicine, v. 3, n. 1, p. 95–101, March 2007.

2 BROGDEN, K. A Antimicrobial peptides: pore formers or metabolic inhibitors in bacteria? **Nature Reviews**, v. 3, p. 238-250, 2005. DOI:10.1038/nrmicro1098.

PG-39A - Desenvolvimento de técnicas espectroscópicas e de microscopia óptica de alta resolução no acompanhamento da ação enzimática durante a hidrólise da biomassa

COLETTA, V. C.¹; CONCEIÇÃO, F. R.¹; GALAN, D. C.¹; POLIKARPOV, I.¹; GUIMARÃES, F. E. G.¹

vitor.coletta@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A atividade enzimática sobre a biomassa poderá possibilitar o aumento da produção de etanol sem a necessidade de se expandir a área plantada de cana-de-açúcar (1, 2). Para isso, é importante determinar as condições de interação de enzimas com a celulose e a relação dessa interação com a atividade enzimática. Utilizamos as espectroscopias de absorção e de luminescência para estudar a interação da cellobiohidrolase I (CBH I) com a celulose de eucalipto a 25 e a 50 °C e em pH's de 3 a 8. Para determinar o caráter de carga da superfície da parede celular, analisamos a interação da celulose com uma porfirina denominada Photogem®, que possui dois grupos carboxílicos atuando como sítios de interação e é desprotonada em pH acima de 3,5. Observamos máxima interação da enzima com as fibras na região de pH ácido e atividade enzimática mais eficiente entre pH's 5 e 7. Estudos adicionais serão feitos com microscopia.

Palavras-chave: Enzimas. Celulose. Espectroscopia.

Referências

- 1 MARQUES, F. O alvo é o bagaço. **Pesquisa FAPESP**, n. 163, p. 16-20, 2009. Disponível em: <<http://www.revistapesquisa.fapesp.br/pdf/163/016-020-163.pdf>>. Acesso em: julho 2011.
- 2 BECKHAM, G. T. et al. Identification of amino acids responsible for processivity in a family 1 carbohydrate-binding module from a fungal cellulase. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 114, n. 3, p. 1447-1453, Jan. 2010.

PG-40A - Estudos de morfologia e dinâmica das cadeias de POE em polímeros dopados com Lítio

BEZERRA, W. S.¹; AZEVEDO, E. R.¹; COBO, M. F.¹; FERREIRA, A. G.¹; BONAGAMBA, T. J.¹

bezerra.ifsc@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Copolímeros compostos por polioxidoetileno (POE) ou Polietileno Glicol (PEG –POE de baixo peso molecular) e poliestireno (PS) são candidatos a utilização como condutores iônicos em baterias de estado sólido. Esses copolímeros podem assumir morfologias diversas, com a formação de domínios de POE imersos em uma matriz de PS ou vice-versa. Em temperatura ambiente, a alta mobilidade das cadeias de POE garante a boa condução iônica dos compostos, tornando importante caracterizar a mobilidade das cadeias e a estruturas de domínios formadas.¹ Neste trabalho, usaremos a metodologia de RMN para obter informações sobre a morfologia e dinâmica de copolímeros di- e tri-bloco compostos por POE-PS (polioxietileno-poliestireno), e também outros copolímeros contendo acrilatos ramificados com POE embebidos em uma matriz de PS (MAPEG – do inglês Methyl Acrylate Polyethylene Glicol). A aplicamos técnicas convencionais de RMN para obter espectros de ⁷Li e ¹H, ¹³C (usando técnicas de polarização cruzada (CPMAS) e direta (DPMAS)) como função da temperatura para caracterizar as principais transições dinâmicas, onde inferimos a existência de segmentos de mobilidades distintas nas cadeias do POE. A existência dessas duas regiões foram confirmadas pela técnica DIPSHIFT, que também revelara que nos copolímeros MAPEG as cadeias de POE adotam uma conformação preferencial em certas temperaturas². Outra técnica utilizada neste trabalho foi a de difusão de spin com aquisição de ¹³C, onde fora observada a difusão de spins da cadeia do POE para os PS e MMA (no caso do MAPEG). Além disso, aplicamos a técnica de difusão de spins para verificar a presença de domínios de segmentos rígidos no sistema. Apresentaremos uma descrição geral das técnicas estudadas e os dados obtidos até o momento.

Palavras-chave: RMN. Copolímeros. Condutores iônicos.

Referências

1 SCHMIDT-ROHR, K. **Multidimensional solid-state NMR and polymers**. London: Academic Press, 1994. v. 1.

2 Tonelli, A. E. **NMR spectroscopy and polymer microstructure: the conformational connection**. New York: VCH, 1989.

PG-41A - Imunossensores baseados em guias de onda planares para o diagnóstico de doenças negligenciadas

FIGUEIREDO, Alessandra¹; VIEIRA, Nirton Cristi Silva¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

afigueiredo17@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O desenvolvimento de métodos diagnósticos e a procura de novos fármacos no que se refere à doenças negligenciadas são de grande interesse, visto que milhões de pessoas em diversos países sofrem destes males, que ainda se mostram sem diagnóstico e tratamento eficientes (1). Visando a alteração deste quadro, propomos o desenvolvimento de um sensor capaz de diagnosticar algumas destas doenças, por exemplo dengue e Doença de Chagas. Resultados preliminares obtidos em nosso grupo indicaram que a luz confinada em guias de ondas planares à base materiais luminescentes, como alumina porosa e polímeros conjugados dispersos em uma matriz acrílica, sofrem forte interação com a cavidade óptica e o meio em que ela está inserida (2, 3). A luz emitida pelo guia de onda é composta de modos de propagação estreitos espectralmente que são extremamente sensíveis às mudanças das condições de contorno da cavidade, ou seja, à presença de materiais quando confinados dentro dos poros ou mesmo sobre a sua superfície. Assim, na presente atividade serão utilizados guias de onda planares orgânicos e inorgânicos como substrato para a imobilização de anticorpos específicos aos抗ígenos das doenças de interesse e sensoriamento. Desta forma, propõem-se o estudo destes materiais e sua utilização como imunossensores ópticos (4). Apesar da enorme versatilidade para aplicações como sensores, alguns aspectos fundamentais relacionados à preparação e à física por trás da construção e aplicação destas estruturas como dispositivos sensores ainda representa um grande desafio.

Palavras-chave: Imunossensor. Guia de onda. Doenças negligenciadas.

Referências

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Tropical diseases.** Disponível em: http://www.who.int/topics/tropical_diseases/en/. Acesso em 13 Ago. 2011.
- 2 VALE, M. M. **Guias de onda poliméricos para sensoriamento óptico e conversão de comprimentos de onda.** 2010. 112 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 3 STRIXINO, F. T.; GUIMARÃES, F. E. G. Active waveguide effects from porous anodic alumina: an optical sensor proposition. **Applied Physics Letters**, v. 97, n. 011902, p.1-3, 2010.
- 4 LUPPA, P. B.; SOKOLL, L. J.; CHAN, D. W. Immunosensors: principles and applications to clinical chemistry. **Clinica Chimica Acta**, v. 314 , n. 1-2, p. 1–26, 2001.

PG-42A - Estudos estruturais de alosterismo enzimático usando métodos de simulação computacional

CÂMARA, Amanda Souza¹; TEIXEIRA, Francesco Brugnera¹; REBOREDO, Eduardo Horjales¹
amanda.camara@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O projeto pretende confirmar a proposta de que existe uma oscilação de baixa frequência na dinâmica de uma proteína alostérica, e ela permite um equilíbrio populacional entre seus estados estáveis. Assim, o ligante contribuiria para deslocar este equilíbrio no sentido de promover uma troca na preponderância populacional dos estados. A enzima em questão é a glucosamina 6 fosfato desaminase, GLN6PD, cujos estados T e R já foram resolvidos por técnicas cristalográficas. O alvo, especificamente, é determinar a frequência de oscilação da transição alostérica. Para isso, deve ser gerada uma simulação de 100ns da GLN6PD em que esta deve transicionar do estado T para o R e vice-versa periodicamente. Não interagindo com o ligante, espera-se observar um equilíbrio deslocado para o estado T. Esta dinâmica está sendo simulada no campo de força CHARMM usando o programa NAMD, e também o VMD para visualização e análise. O modelo da simulação é o de um ensemble canônico, NVT, em que a energia não se mantém fixa, mas o número de átomos, o volume e a temperatura sim, mantendo a proteína solvatada (solvente explícito) como um sistema fechado num banho térmico. Usando um microcomputador com processador INTEL coreI7 2600 (sand-brigge) (com 4 núcleos físicos e 8 virtuais) com uma memória RAM de 15GB. Já obteve-se uma de trajetória 60 ns em 50 dias de cálculo. O sistema possui 92000 átomos. Estima-se que ao final de três meses haverá uma dinâmica simulada da trajetória da GLN6PD em um banho térmico. Gerada a dinâmica, deverão ser feitas análises da trajetória para identificar a oscilação, determinar o modo normal preponderante e calcular a frequência de oscilação por análise de Fourier. Também, gráficos de RMSD serão construídos para que indiquem a semelhança estrutural com o estado T ou o estado R, conforme a proteína se desvia de um deles, em sua trajetória, e se aproxima do outro. Neste cartaz, apresentam-se análises feitas a partir da dinâmica de 60 ns.

Palavras-chave: Alosterismo. Flexibilidade estrutural. Dinâmica molecular.

Referências

- 1 RUDIÑO-PIÑERA, E.; MORALES-ARRIETA, S.; ROJAS-TREJO, S. P.; HORJALES., E. Structural flexibility, an essential component of the allosteric activation in *Escherichia coli* glucosamine-6-phosphate deaminase. **Acta Crystallographica D**, v. 58, n. 1, p. 10-20, Jan. 2002.
- 2 HORJALES, E.; ALTAMIRANO, M. M.; CALGAGNO, M. L.; GARRATT, R. C.; OLIVA, G. The allosteric transition of glucosamine-6-phosphate deaminase: the structure of the T state at 2.3 Å resolution. **Structure**, v. 7, n. 5, p. 527–537, May. 1999.

3 VALENCIA SWAIN, J. O. **Análisis dinámico del cambio alostérico de la glucosamina-6-fosfato desaminasa de Escherichia coli**. 2007. Tesis (Maestría en Ciencias Bioquímicas) - Instituto de Biotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2006.

4 BROOKS, B. R.; BRUCCOLERI, R. E.; OLAFSON, B. D.; STATES, D. J.; SWAMINATHAN, S.; KARPLUS, M. CHARMM: a program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations. **Journal of Computational Chemistry**, v. 4, n. 2, p. 187-217, 1983. DOI: 10.1002/jcc.540040211.

PG-43A - Inativação fotodinâmica de micro-organismos causadores de onicomicose

SILVA, Ana Paula da¹; BORTOLET, Natalia Mayumi Inada¹

paulalsir@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física São Carlos - Universidade de São Paulo

A onicomicose é uma infecção fúngica que atinge as unhas. As fontes de infecção podem ser o solo, animais, outras pessoas ou alicates e tesouras contaminados (1). Ainda não existe tratamento 100% eficaz tanto para o tratamento da caspa, como da onicomicose (2). Nesta pesquisa apresentamos os resultados clínicos de 39 pacientes portadores de onicomicose severa, que já não responde mais aos tratamentos convencionais e que estão sendo tratados por Terapia Fotodinâmica (TFD). Esta técnica consiste no emprego de dois compostos fotossensibilizadores veiculados na forma de solução e aplicados topicalmente nas unhas que, quando ativados por luz em comprimento de onda adequado para excitar as moléculas da substância fotossensível, promoverá a formação do oxigênio tóxico (principalmente o oxigênio singuleto) às células alvo (fungos e bactérias), induzindo a morte celular (3). Como agente fotossensibilizador utilizamos o Photogem® (5 µg/ml) e solução contendo curcuminóides (1500 µg/ml). As fontes de luz contendo LEDs (diodos emissores de luz) foram desenvolvidas anatomicamente para iluminar de maneira eficaz a região acometida pela doença. Utilizamos o equipamento cujos LEDs emitem em 630 nm para o grupo que está sob tratamento com o Photogem®; para o grupo dos curcuminóides utilizamos o equipamento que emite luz no comprimento de onda em 475 nm. Nossos resultados mostram que a TFD é eficaz no tratamento dos micro-organismos causadores da onicomicose e que o grupo tratado com a mistura de curcuminóides apresenta resultados clínicos mais rápidos quando comparado com o grupo do Photogem®. Outros experimentos (*in vitro* e ensaios laboratoriais) estão em andamento para a melhor caracterização da doença e correlacionar os resultados obtidos com a eficácia do tratamento.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Fotossensibilizador. Onicomicose.

Referências

- 1 ARAÚJO, J. G. et al. Onicomicosis por fungos emergentes: análise clínica, diagnóstico laboratorial e revisão. **Anais Brasileiros de Dermatologia**, Rio de Janeiro, v. 78, n. 4, p. 445-455, jul./ago. 2003.
- 2 ELEWSKI, B. E. Clinical pearl: diagnosis of onychomycosis. **Journal of the American Academy of Dermatology**, v. 32, n. 3, p. 500-501, Mar. 1995. DOI: 10.1016/0190-9622(95)90075-6.
- 3 INADA, N. M.; KURACHI, C.; COSTA, M. M.; BAGNATO, V. S. Photodynamic therapy in the treatment of condyloma by HPV. **Brazilian Journal of Laser**, v. 2, p. 21-24, 2010.

PG-44A - Faseamento experimental da proteína beta-galactosidase de *Bifidobacterium bifidum*

GODOY, Andre Schutzer de¹; CAMILO, Cesar Moises¹; POLIKARPOV, Igor³
andregodoy@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Hidrolases de glicosídeos pertencem a um grupo bastante diversificado de enzimas que atuam em ligações glicosídicas. Baseado na sua classificação estrutural conhece-se atualmente mais de 120 famílias de hidrolases de glicosídeos. As β -galactosidases (β -GAL) podem ser encontradas principalmente nas famílias 1, 2, 35, 42, 53 e 98 das hidrolases de glicosídeos. Essas enzimas são capazes de realizar dois tipos distintos de catálise: uma reação de hidrólise, que rompe a ligação hidrolítica (galactosil $\beta(1 \rightarrow 4)$ glicose) entre a glicose e a galactose de uma molécula de lactose; e uma reação de transgalactosilação, que transfere a galactose do sítio ativo da enzima para um sacarídeo, formando diferentes tipos de galactooligossacarídeos (1). Essa propriedade da β -galactosidase tornou-a o principal mecanismo de produção de galactooligossacarídeos no mundo. Nossa objetivo é entender bases moleculares da função e da estabilidade das β -galactosidases de *Bifidobacterium bifidum*, através da resolução de suas estruturas cristalográficas, estudos funcionais e sua caracterização biofísica e bioquímica. A análise da estrutura da beta-galactosidase está sendo feita por faseamento experimental através da combinação de dados nativos e dados derivados.

Palavras-chave: Cristalografia. Enzimas. Estrutura.

Referências

- 1 HUBER, R. E.; KURZ, G.; WALLENFELS, K. A quantitation of the factors which affect the hydrolase and transgalactosylase activities of β -galactosidase (E. coli) on lactose. **Biochemistry**, v. 15, n. 9, p. 1994-2001, 1976.

PG-45A - Estudo estrutural de enzimas da via de salvação de purinas de *Schistosoma mansoni*

SILVA NETO, Antônio Marinho da¹; GARRAT, Richard Charles¹

amarinho@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Grupo de Cristalografia - Universidade de São Paulo

A Schistosomiase é uma das doenças tropicais negligenciadas de maior incidência no mundo, estima-se que atinja cerca de 210 milhões de pessoas em 76 países (1). Entre as cinco espécies que infectam humanos, o *Schistosoma mansoni* é a especie predominante na América e na África e de maior importância epidemiológica. O único tratamento eficaz disponível baseia-se na utilização de praziquantel (PZQ) e este é eficaz contra todas as espécies (2). No entanto, existem relatos de falhas de tratamento e o surgimento de cepas de schistossomas resistentes (3; 4). Por esta razão, se faz necessário a busca de novas alternativas de conduta terapêutica. Um alvo promissor para novas drogas é a via de salvação de purinas do *S. mansoni*, uma vez que este é incapaz de sintetizar purinas pela via de novo, de modo que depende exclusivamente das vias de salvação para suprir as necessidades de síntese de DNA e RNA. Entender os detalhes estruturais das proteínas que compõe essa via de salvação contribuirá para a descoberta de novos alvos terapêuticos e para o melhor entendimento dos detalhes metabólicos de Schistosomas. Uma vez que a proposta faz parte de um programa maior de estudos de todas as enzimas envolvidas na salvação e síntese de purinas e pirimidinas, com a participação de vários alunos do grupo, a primeira etapa do presente projeto será a definição dos alvos específicos a serem estudados. Para tal levaremos em conta dados da literatura sobre a importância metabólica de cada enzima além de resultados preliminares do nosso próprio grupo sobre a facilidade de expressar e cristalizar as enzimas de interesse.

Palavras-chave: *Schistosoma*. Purinas. Pirimidinas.

Referências

- 1 STEINMANN, P.; KEISER, J.; BOS, R.; TANNER, M.; UTZINGER, J. Schistosomiasis and water resources development: systematic review, meta-analysis, and estimates of people at risk. **Lancet Infectious Diseases**, v. 6, n. 7, p. 411–425 , 2006.
- 2 CAFFREY, C. R. Chemotherapy of schistosomiasis: present and future. **Current Opinion in Chemical Biology**, v. 11, n. 4, p. 433-439, 2007.
- 3 SILVA, I. M.; THIENGO, R.; CONCEICAO, M. J.; REY, L.; LENZI, H. L.; PEREIRA FILHO, E.; RIBEIRO, P. C. Therapeutic failure of praziquantel in the treatment of *Schistosoma haematobium* infection in Brazilians returning from Africa. **Memórias do Instituto Oswaldo Cruz**, v. 100, n. 4, p. 445–449, 2005.
- 4 WOLFE, M. S. *Schistosoma mansoni* infection: failure of standard treatment with praziquantel in a returned traveler. **Transactions of the Royal Society of Tropical Medicine and Hygiene**, v. 97, n. 6, p. 720, 2003.

PG-46A - Expressão, purificação e caracterização molecular e estrutural de uma proteína quimera (domínios glicosilhidrolase e expansina) da bactéria *Xanthomonas campestris*

TOMAZINI JUNIOR, Atílio¹; POLIKARPOV, Igor¹

atilio.tomazini@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Materiais lignocelulósico provindos da agricultura, resíduos industriais e florestais contribuem para a maior parte da biomassa disponível para transformação em biocombustíveis renováveis. Para iniciar a utilização destes como fontes para biocombustíveis a conversão dos componentes celulósicos em açúcares fermentáveis é necessária. Uma variedade de microorganismos, como bactérias e fungos podem ter os agentes promotores da depolimerização da biomassa celulósica em monômeros de glicose (1). A idéia geral deste projeto é estudar uma quimera natural composta por um domínio catalítico (glicosilhidrolase) e um domínio expansina, logo a compreensão estrutural e da atividade desta quimera constituem na motivação deste estudo.

Palavras-chave: *Xanthomonas campestris*. Glicosilhidrolase. Expansina.

Referências

- 1 KUMAR, R. et al. Bioconversion of lignocellulosic biomass: biochemical and molecular perspectives. **Journal of Industrial Microbiology Biotechnology**, v. 35, n. 5, p. 377-91, 2008.

PG-47A - Caracterização estrutural e funcional de FleQ de pseudomonas e xanthomonas: um importante fator de transcrição envolvido na expressão de genes flagelares e formação de biofilme

MATSUYAMA, Bruno Yasui¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹
brunomatsuyama@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Sabe-se que o processo de formação do biofilme está relacionado a diversos fatores, como quantidade de nutrientes e presença de antibióticos (1), contudo somente nos últimos anos esse processo tem sido elucidado a nível molecular, com destaque para a molécula c-di-GMP, encontrada apenas entre as bactérias e cujos níveis intracelulares regulam adesão celular e síntese de exopolissacarídeos, controlando assim, a formação de biofilmes, responsáveis por uma série de doenças infecciosas principalmente em indivíduos imuno-comprometidos (2, 3). Poucos alvos moleculares de c-di-GMP foram identificados até o momento, entre eles, FleQ de Pseudomonas aeruginosa (PA), um fator de transcrição que é o principal responsável pela expressão dos genes flagelares e que atua também como repressor da síntese de exopolissacarídeos, esta última função sendo mediada por c-di-GMP (4-6). Estudos recentes apontam que a FleQ de Xanthomonas também está envolvida na expressão dos genes flagelares, contudo, atuando na repressão desse processo, sugerindo que FleQ apresente funções distintas em diferentes bactérias (7, 8). A alta identidade entre FleQ de Xanthomonas axonopodis (XA) com FleQ PA, leva a possibilidade de que esta também seja um receptor de c-di-GMP. Desta forma, este projeto visa a caracterização estrutural e funcional da FleQ PA e XA, e consequente estabelecimento de um novo mecanismo de interação entre esse mensageiro secundário com FleQ além da determinação de novos motivos de interação. Até o momento os fragmentos gênicos de FleQ PA e XA e de seus moduladores, FleN PA e XA, foram isolados e clonados no vetor de expressão ppSUMO e protocolos de purificação foram estabelecidos, exceto para FleN XA, a qual apresentou problemas de solubilidade. Além disto, estudos de formação e isolamento do complexo FleQ-FleN PA foram iniciados, permitindo a sua reconstituição in vitro, e por fim, ensaios cristalográficos estão sob andamento. A longo prazo, esses estudos poderão levar ao desenvolvimento de novas ferramentas e alvos para o desenvolvimento de agentes contra infecções bacterianas.

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

Referências

- 1 O'TOOLE, G.; KAPLAN, H.B. ; KOLTER, R. Biofilm formation as microbial development. **Annual Review of Microbiology**, v. 54, p. 49-79, 2000. DOI: 10.1146/annurev.micro.54.1.49.
- 2 JENAL, U.; MALONE, J. Mechanisms of cyclic-di-GMP signalling in bacteria. **Annual Review of Genetics**, v. 40, p.385-407,2006. DOI: 10.1146/annurev.genet.40.110405.090423.

3 WOLFE, A.J.; VISICK, K.L. Get the message out: cyclic-di-GMP regulates multiple levels of flagellum-based motility. **Journal of Bacteriology**, v. 190, n. 2, p. 462-75, 2008.

4 ARORA, S. K.; RITCHINGS, B. W.; ALMIRA, E. C.; LORY, S.; RAMPHAL, R. A transcriptional activator, FleQ, regulates mucin adhesion and flagellar gene expression in *pseudomonas aeruginosa* in a cascade manner. **Journal of Bacteriology**, v. 179, n. 17, p. 5574-5581, Setp.1997.

5 DASGUPTA, N.; ARORA, S.K.; RAMPHAL, R. FleN, a gene that regulates flagellar number in *pseudomonas aeruginosa*. **Journal of Bacteriology**, v. 182, n. 2, p. 357-364, Jan. 2000.

6 HICKMAN, J. W.; HADARWOOD, C. S. Identification of FleQ from *pseudomonas aeruginosa* as a c-di-GMPresponsive transcription factor. **Molecular Microbiology**, v. 69, n. 2, p. 376-289, 2008. DOI:10.1111/j.1365-2958.2008.06281.

7 HU, R. M.; YANG, T. C., YANG, S. H.; TSENG, Y. H. Deduction of upstream sequences of *Xanthomonas campestris* flagellar genes responding to transcription by FleQ. **Biochemical and Biophysical Research Communication**, v. 335, n. 4, p. 1035-1043, Oct. 2005.

8 TAO, J.; HE, C. Response regulator, VemR, positively regulates the virulence and adaptation of *Xanthomonas campestris* pv. *campestris*. **FEMS Microbiology Letters**, v. 304, n. 1, p. 20-28, 2009. DOI:10.1111/j.1574-6968.2009.01892.

PG-48A - Estudos estruturais de xilose isomerase de *Lactobacillus crispatus*

REIS, Caio Vinicius dos¹; POLIKARPOV, Igor¹

caio.reis@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A demanda por combustíveis baseados em recursos renováveis é alta nos dias de hoje e tende a aumentar bastante no futuro. Indústrias de bicombustíveis produzem principalmente etanol a partir de amido de milho ou cana-de-açúcar (no caso do Brasil). Em contrapartida, esses combustíveis de primeira geração estão enfrentando a concorrência das indústrias de alimentos e ração animal, tanto devido à matéria-prima como ao espaço ocupado na produção (1). Por outro lado, a biomassa lignocelulósica, compreendendo resíduos de culturas, resíduos florestais, sólidos urbanos, é explorada como um elevado potencial secundário na produção de biocombustíveis, mesmo na categoria de subprodutos, eliminando assim os usos competitivos. Afirma-se que o bagaço de cana-de-açúcar é constituído 28% por hemicelulose sendo a xilose seu principal componente (2). Uma das peças-chave no metabolismo da xilose é a enzima xilose isomerase (E.C. 5.3.1.5) (3). Esta enzima está presente na maioria dos organismos existentes, geralmente apresentando dois domínios. Em *Lactobacillus crispatus* ela apresenta um número reduzido de aminoácidos, sugerindo ser constituída apenas do domínio catalítico. Alguns estudos foram então realizados com essa enzima. Inicialmente, sua clonagem foi feita por LIC (Ligation Independent Cloning)(4) e a expressão em *Escherichia coli*. A purificação foi realizada por afinidade em resina de níquel seguida de uma gel filtração. Experimentos de Dicroísmo Circular e Fluorescência permitiram a análise da composição e estabilidade da sua estrutura secundária, além da disposição de alguns aminoácidos em diferentes condições. Também foram realizados estudos de Espalhamento de raios-x a baixo ângulo (SAXS) e Espalhamento dinâmico de luz (DLS), revelando sua estrutura em solução. Outros estudos ainda estão por vir, a fim de analisar o reflexo estrutural de mudanças na sua composição primária. Esse entendimento representa um importante passo na busca de possíveis melhorias na utilização industrial dessa enzima, refletindo positivamente na produção sustentável de etanol de segunda geração.

Palavras-chave: Xilose isomerase. Bioetanol. *Lactobacillus crispatus*.

Referências

1 BOLES, E.; WEBER, C.; FARWICK, A.; DAVID, B.; DIETZ, H.; SUBTIL, T. Trends and challenges in the microbial production of lignocellulosic bioalcohol fuels. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 87, n. 4, p. 1303-1315, 2010.

2 PANDEY, A.; AOCCOL, C. R.; NIGAM, P.; SOCCOL, V. T. Biotechnological potential of agro-industrial residues I: sugarcane bagasse. **Bioresource Technology**, v. 74, n. 1, p. 69-80, 2000.

3 Jeffries, T. W. Genetic engineering for improved xylose fermentation by yeasts. **Advances in Biochemical Engineering Biotechnology**, v. 65, p. 117-161, 1999.

4 HAUN, R. S.; SERVENTI, I. M.; MOSS, J. Rapid, reliable ligation-independent cloning of PCR products using modified plasmid vectors. **BioTechniques**, v. 13, n. 4, p. 515-516, 1992.

PG-49A - Nanopartículas core-shell superparamagnéticas para aplicação em medicina: hipertermia aplicada ao tratamento de câncer

BALLESTEROS, Camilo Arturo Suárez¹; SANTOS, Fabricio A.¹; MARANGONI, Valéria Spolon¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

carturosuarzezb@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Pesquisas em hipertermia com nanopartículas para terapia em células cancerígenas envolvem basicamente duas vertentes, sendo 1) Interação de campos magnéticos alternados com nanopartículas magnéticas(1) que aquecem localmente o sistema celular, causando necrose, ou 2) Terapia fototérmica com aplicação de laser em nanopartículas de ouro que aquecem devido à absorção óptica, levando também à morte celular. Nesse projeto, desenvolvemos ambas as técnicas experimentais com campos magnéticos alternados ou terapia fototérmica, através da utilização de nanopartículas superparamagnéticas ou do tipo core-shell (2), com núcleo magnético recobertas com ouro, respectivamente. A síntese das nanopartículas foi realizada por processo químico, utilizando-se dendrímero poliamidoamina (PAMAM) ou DEXTRAN como agentes estabilizantes. As nanopartículas são caracterizadas utilizando-se espalhamento dinâmico de luz e espectroscopia no UV-Vis e no infravermelho. Paralelamente à síntese das nanopartículas também foi desenvolvido o equipamento para indução do campo magnético alternado, em freqüências da ordem de 100 a 500 KHz. Com a aplicação desse campo oscilante, foi possível induzir aumentos de temperatura nas soluções de nanopartículas de cerca de 8 oC, suficiente para induzir morte celular.

Palavras-chave: Hipertermia. Nanopartículas core-shell. Nanomedicina.

Referências

- 1 VENKATASUBRAMANIAM, S; BUMSOO, H; BRUCE, H; THOMAS, S. In vitro characterization of movement, heating and visualization of magnetic nanoparticles for biomedical applications. **Nanotechnology**, v. 16, p. 1221–1233, 2005.
- 2 LINGYAN, W. et al. Core@shell nanomaterials: gold-coated magnetic oxide nanoparticles. **Journal of Materials Chemistry**, v. 18, n. 23, p. 2629–2635, 2008.

PG-49B - Core-shell superparamagnetic nanoparticles for application in medicine: hyperthermia applied to cancer treatment

BALLESTEROS, Camilo Arturo Suárez¹; SANTOS, Fabricio A.¹; MARANGONI, Valéria Spolon¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

carturosuarzb@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Recent advances in hyperthermia have led to the development of two experimental techniques comprising the use of 1) oscillating magnetic fields(1), or 2) laser excitation (photothermia) applied on magnetic and gold nanoparticles, respectively, to induce necrosis in cancer cells. In this study both strategies have been used to generate local heating in nanoparticulated systems comprising magnetic iron oxide (Fe_3O_4) nanoparticles, or core-shell $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Au}$ nanoparticles (2). The nanoparticles were chemically synthesized in the presence of both polyamidoamine dendrimer (PAMAM) or dextran, which acted as stabilizing agents. Characterization of nanoparticles had been carried out via dynamic light scattering and UV-Vis and infrared spectroscopies. We have also developed a system for application of the oscillating magnetic field capable of operating in the range of 100 to 500 KHz. Under application of the oscillating field, an increase in the temperature in the nanoparticles solution of ca. 8 oC has been obtained, which is sufficient to induce cellular necrosis.

Keywords: Hyperthermia. Core-Shell nanoparticles. Nanomedicine.

References

- 1 VENKATASUBRAMANIAM, S; BUMSOO, H; BRUCE, H; THOMAS, S. In vitro characterization of movement, heating and visualization of magnetic nanoparticles for biomedical applications. **Nanotechnology**, v. 16, p. 1221–1233, 2005.
- 2 LINGYAN, W. et al. Core@shell nanomaterials: gold-coated magnetic oxide nanoparticles. **Journal of Materials Chemistry**, v. 18, n. 23, p. 2629–2635, 2008.

PG-50A - Informação sensorial e o controle motor da direção de vôo em *Chrysomya megacephala*: uma abordagem sistêmica

SILVÉRIO, Carolina Menezes¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹; KOBERLE, Roland¹

carolina.silverio@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Neste trabalho desenvolvemos um aparato experimental para medir a atividade dos potenciais de ação (spikes) dos músculos que controlam o vôo em moscas *Chrysomya megacephala*. As medidas eletrofisiológicas são feitas, fixando apenas parte do corpo da mosca (as asas podem bater livremente), enquanto ela observa um padrão de barras verticais (1) que se move no sentido horizontal, controlado por computador. O objetivo é analisar a relação entre a resposta dos músculos e o estímulo visual, a fim de verificar como podemos usar a resposta motora para controlar a imagem em tempo real (2). Os desdobramentos desse trabalho possibilitarão realizar experimentos no quais a própria mosca controlará o movimento da imagem ao tentar mudar a direção de seu vôo, criando assim um ambiente de vôo virtual. Isso permitirá um aprimoramento nos experimentos com sistema visual da mosca, tradicionalmente utilizado como paradigma de processamento de informação visual por um sistema nervoso. Em vários estudos registra-se o comportamento dos spikes de um neurônio do sistema visual da mosca, o H1, enquanto o inseto observa a imagem (3). Como a mosca não tem qualquer poder de interferir no estímulo visual, não se pode afirmar com certeza se o comportamento de disparos do H1 é puramente sensorial ou não. Sabe-se que em animais superiores, mesmo a atividade da região do córtex mais próxima do estímulo visual (V1) que acreditava-se ser um simples mapeamento retinotópico físico, é altamente influenciada pelo estado de atenção do indivíduo (4). Assim esse projeto de mestrado consiste de um primeiro passo para o estudo de um problema ainda em aberto. Nossos experimentos inéditos permitirão verificar se a resposta do neurônio H1 muda ou não quando o controle do vôo é executado pela mosca.

Palavras-chave: Músculos de direção. Informação sensorial. H1.

Referências

1 GAZZIRO, M. A. **Desenvolvimento e implementação de instrumentação eletrônica para criação de estímulos visuais para experimentos com o duto óptico da mosca**. 2009. 87 p. Tese (Doutorado) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

2 PINTO, R. D.; ELSON, R. C.; SZUCS, A.; RABINOVICH, M. I.; SELVERSTON, A. I.; ABARBANEL, H. D. Extended dynamic clamp: controlling up to four neurons using a single desktop computer and interface. **Journal of Neuroscience Methods**, v. 108, n. 1, p. 39-48, July 2001. DOI: 10.1016/S0165-0270(01)00368-5.

3 BORST, A.; HAAG, J. Neural networks in the cockpit of the fly. **Journal of Comparative Physiology A**, v. 188, n. 6, p. 419-437, July 2002. DOI: 10.1007/s00359-002-0316-8.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

- 4 MÜSSELER, J.; WÜHR, P.; DANIELMEIER, C.; ZYSSET, S. Action-induced blindness with lateralized stimuli and responses. **Experimental Brain Research**, v. 160, n. 2, p. 214-222, Jan. 2005. DOI: 10.1007/s00221-004-2009-8.

PG-51A - Modificação da fluorescência de derivados de porfirina para aplicações em diagnóstico fotodinâmico – estudos “in vitro” e “in vivo”

ANDRADE, Cintia Teles de¹; VOLLET FILHO, José Dirceu¹; SALVIO, Ana Gabriela²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹

cintya_teles@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de pele e partes moles - Hospital Amaral Carvalho de Jau

Os casos de câncer vêm aumentando muito no Brasil nos últimos anos e o câncer de pele está entre os tipos mais incidentes (1). O diagnóstico precoce de um câncer de pele permite tratar lesões logo nos primeiros estágios da doença, melhorando as condições do paciente. Assim, se torna de grande importância desenvolver técnicas para auxiliar o diagnóstico. A fluorescência marcada consiste em usar o ácido aminolevúlico (ALA) como biomarcador, pois ele tem maior seletividade para a formação da PpIX em células malignas, e aplicar luz (região do UV-Azul) para análise da fluorescência (2). Torna-se, então, necessário entender melhor qual o comportamento da luz em um meio turbido (nesse caso, um phantom de pele). Para a análise “in vitro” foi usado um phantom de pele contendo 2% de nanquim, 1% de lipofundin e 5% BRIJ-35 (3), uma solução espalhadora, outra absorvedora e água. Photogem foi mergulhado nessas soluções e iluminado de formas diferentes para estudar o comportamento da fluorescência, da luz de excitação e da excitação e fluorescência ao mesmo tempo (como ocorre com o aparelho de diagnóstico). “In vivo”, uma solução de ALA foi aplicada em lesões e em intervalos regulares de tempo (15, 30, 45 e 60 minutos), as imagens de fluorescência foram coletadas com o sistema de diagnóstico por fluorescência. Foi observado que os maiores comprimentos de onda são mais afetados pela absorção enquanto os menores são mais espalhados. E, que o limitante do diagnóstico é a luz UV, que chega a uma menor profundidade que a luz vermelha emitida pelas moléculas fluorescentes. Na parte clínica, o ALA proporcionou uma fluorescência marcada que distinguiu a pele normal da lesionada e contribuiu também para a identificação da borda da lesão, o que é muito importante para um tratamento eficaz.

Palavras-chave: Diagnóstico. Lesões de pele. Fluorescência.

Referências

1 INSTITUTO NACIONAL DO CANCER. INCA. **Estimativa 2010:** incidência de câncer no Brasil. Rio de Janeiro: INCA, 2009.

2 VALENTINE, R. M.; IBBOTSON S. H.; BROWN C. T. A.; WOOD, K.; MOSELEY, H. Quantitative comparison of 5-Aminolevulinic acid- and Methyl Aminolevulinate-induced fluorescence, photobleaching and pain during photodynamic therapy. **Photochemistry and Photobiology**, v.87, n. 1,p. 242–249, 2011. DOI: 10.1111/j.1751-1097.2010.00829.x.

3 KEPshire, D.; DAVIS, S. C.; DEHGHANI, H.; PAULSEN, K. D.; POGUE, B. W. Fluorescence tomography characterization for sub-surface imaging with protoporphyrin IX. **Optics Express**, v. 16, n. 12, p. 8581-93, June 2008.

PG-52A - Caracterização de proteínas codificadas por genes de micro-exon de *Schistosoma mansoni*

ORCIA, Débora¹; DEMARCO, Ricardo¹

debbyorcia@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Neste trabalho estamos caracterizando um grupo de proteínas codificadas por genes de micro-exon (MEGs) do verme *Schistosoma mansoni*, um dos agentes causadores da esquistossomose. Esta doença atinge cerca de 76 países tropicais e que afeta aproximadamente 210 milhões de pessoas (1). Devido a capacidade de produção de proteínas variantes pelas MEGs e a verificação que varias proteínas codificadas por estes genes são secretadas, acredita-se elas façam parte de um mecanismo de modulação da resposta do sistema imune do hospedeiro humano (2). Este mecanismo possibilitaria a permanência do parasita por décadas no hospedeiro. Realizamos a expressão de três produtos proteicos de genes micro-exon em sistema heterólogo. Para duas proteínas conseguimos obter produtos solúveis em alta concentração que foram submetidos a purificação utilizando técnicas cromatográficas. A partir das proteínas puras iniciamos ensaios de dicroísmo circular, cromatografia de gel filtração, espectrometria de massa e cristalização com o objetivo de obter maiores informações sobre sua estrutura. Entender qual o papel das proteínas codificadas pelos genes de micro-exon pode possibilitar a criação de uma nova frente de ataque contra essa parasitose, além de possibilitar um melhor entendimento acerca dos mecanismos do sistema imune humano.

Palavras-chave: Micro-exon. *Schistosoma mansoni*. Expressão heteróloga.

Referências

- 1 STEINMANN, P.; KEISER, J.; BOS, R.; TANNER, M.; UTZINGER, J. Schistosomiasis and water resources development: systematic review, meta-analysis, and estimates of people at risk. *Lancet Infectious Diseases*, London, v. 6, n. 7, p. 411–425, July 2006.
- 2 DEMARCO, R.; MATHIESON, W.; MANUEL, S. J; DILLON, G. P.; CURWEN, R. S.; ASHTON, P. D.; IVENS, A. C.; BERRIMAN, M.; VERJOVSKI-ALMEIDA, S.; WILSON, R. A. Protein variation in blood-dwelling schistosome worms generated by differential splicing of micro-exon gene transcripts. *Genome Research*, Woodbury, v. 20, n. 8, p. 1112-1121, Aug. 2010. DOI: 10.1101/gr.100099.109.

PG-53A - Estudos estruturais das poly(A)-binding proteins

LIMA, Gustavo Machado Alvares de¹; DOTTA, Maria Amelia Villela Oliva¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹

gustavoalvareslima@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Trypanossomíases são as maiores causadoras de morte em regiões tropicais do mundo com o agravante da falta de tratamentos efetivos. Várias vias metabólicas e bioquímicas essenciais são encontradas nesses parasitas tornando-os particularmente atrativos para investigações moleculares. Esses eucariotos, em particular o *Trypanosoma brucei*, não possuem mecanismos de controle no nível transcracional, assim a síntese protéica é controlada por processos pós-transcricionais. Genes codificantes de proteína com diferentes funções tem que ser separados co-transcricionalmente por trans-splicing na terminação 5' e poliadenzilado na terminação 3'. Várias proteínas são essenciais para esse processo incluindo a classe das poly(A) -binding proteins (PABP). Essa é a principal proteína citoplasmática que liga mRNA e também participa da poliadenilação de transcritos nucleares. Estudos recentes a relacionam com o início da tradução, mRNA turnover e interação com o CAP estabilizando o mRNA. A proteína citoplasmática de ligação da poli(A), PABP1, está ligada ao início da tradução, e auxilia na estabilidade da proteína por proteger a porção 5' de exonucleases. A PABP2 está ligada aos mesmos processos, mas restrita ao núcleo. Neste trabalho serão estudadas as expressões, purificações e estruturas cristalográficas das proteínas PABP.

Palavras-chave: PABP. Cristalografia. Tripanossoma.

Referências

- 1 PITULA, J.; RUYECHAN, W. T.; WILLIAMS, N. Trypanosoma brucei: identification and purification of a poly(A)-binding protein. **Experimental Parasitology**, Maryland Heights, MO, v. 88, n. 2, p. 157–160, 1998.

PG-54A - Modelagem molecular por homologia da P21 do Trypanosoma cruzi: uma hipótese a sua função

MOREIRA, Heline Hellen Teixeira¹; HORJALES-REBOREDO, Eduardo¹

helinetm@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A proteína P21 do Trypanosoma cruzi participa no processo de infecção da célula hospedeira, desse modo é de grande importância: elucidar as vias de sinalização induzidas pela proteína, bem como caracterizar a nível molecular e estrutural a P21. O que vai auxiliar no entendimento da função biológica da P21 e sua participação no processo de infecção. Foram realizados estudos de modelagem por homologia levaram a elaborar a hipótese de que a P21 tem a função de inibidor de protease tipo Kunitz. O modelo foi realizado em 3 etapas: 1- Procura e seleção da proteína molde nos bancos de dados FastA utilizando como parâmetro de seleção da proteína molde, proteínas oriundas do PDB (Protein Data Bank). 2-Confecção das coordenadas do modelo o qual são geradas coordenadas cartesianas que são dependentes do alinhamento, utilizando-se o programa Coot, onde fez a substituição manual dos aminoácidos da P21 na proteína molde e ajustes das distâncias geométricas, procurando o rotâmero mais provável, realizando ajustes nas restrições de ângulos diedros. 3-Validação do modelo, realizando minimização e equilíbrio de energia no programa NAMD. Utilizou como parâmetro para seleção da proteína molde a análise realizada no alinhamento da P21 frente às proteínas moldes; o qual consiste na avaliação da penalidade causada pelos gaps e aminoácidos não correspondentes no alinhamento na estrutura secundária, no enovelamento geral e nos aminoácidos presentes no sítio catalítico da proteína molde. Com base nisso selecionou-se a proteína molde portadora do código PDB 1YC0_I, que apresenta função de inibidor de protease tipo kunitz com 24,7% de identidade e valor de E-value de 5.9. Uma vez que o modelo foi construído o mesmo foi submetido à minimização de energia e equilíbrio de forma a otimizar uma conformação mais estável do modelo, o qual obteve-se valores de RMSD em torno de 2.8 Å e um o enovelamento geral que não se distanciou do modelo inicial. Com base na modelagem realizada, pode-se hipotetizar que a p21 apresenta função de inibidor de serina protease tipo kunitz.

Palavras-chave: Modelagem. P21. *Trypanosoma cruzi*.

Referências:

- 1 BRANDEN, C.-I.; TOOZE, J. **Introduction to protein structure**. 2nd ed. New York: Garland Publishing, 1999. 410 p.
- 2 PEARSON, W. R. Rapid and sensitive sequence comparison with FASTP and FASTA. **Methods in Enzymology**, v. 183, p. 63-98, 1990. ISSN 0076-6879.

PG-55A - Estudo computacional da difusão térmica em proteínas termoestáveis

MUNIZ, Heloisa dos Santos¹; MARTINEZ, Leandro¹

heloisadsm@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Mecanismos de difusão de energia vibracional em biomoléculas têm sido relacionadas a estabilidade, alosterismo e sinalização intramolecular. Neste trabalho nós utilizamos uma metodologia computational para discutir o fluxo de energia em proteínas. O estudo de difusão térmica é feito por simulações de Dinâmica Molecular, o qual provém artifícios nos quais não são possíveis experimentalmente: a proteína é esfriada a baixas temperaturas e apenas um resíduo é aquecido através do acoplamento de um banho térmico (1). Consequentemente, o calor flui do aminoácido aquecido para a proteína, revelando os caminhos da difusão da energia vibracional. Pelo fato de que proteínas termoestáveis possam ter particulares mecanismos de relaxação, distribuição e dissipação da energia vibracional, elas são sistemas interessantes para o método ser aplicado. A partir desta análise, um padrão de difusão de calor de uma proteína termofílica pode ser identificado e comparado com outro de uma proteína homóloga mesofílica, em especial, pertencentes à família Xilanases 11. Importantemente, revelando os mecanismos da difusão anisotrópica térmica de proteínas termofílicas, novas abordagens para o desenvolvimento racional de proteínas com estabilidade e atividades moduladas poderão ser sugeridas.

Palavras-chave: Difusão de energia vibracional. Dinâmica molecular. Estabilidade térmica.

Referências

1 OTA, N.; AGARD, D. A. Intramolecular signaling pathways revealed by modeling anisotropic thermal diffusion. **Journal of Molecular Biology**, v. 351, n. 2, p. 345-354, 2005.

PG-55B - Computational study of thermal diffusion in thermostable proteins

MUNIZ, Heloisa dos Santos¹; MARTINEZ, Leandro¹

heloisadsm@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Mechanisms of vibrational energy diffusion in biomolecules have been related to stability, allostery and intramolecular signaling. Here we utilize a computational methodology to address energy flow in proteins. The study of thermal diffusion is done using Molecular Dynamics simulations, providing artifices which are not available experimentally: the whole protein is cooled to very low temperatures and only a residue is heated by coupling it to a thermal bath (1). Thus, the heat flows from the heated residue to the protein, revealing the pathways of vibrational energy diffusion. Because the thermostable proteins may have particular mechanisms of relaxation, distribution and dissipation of vibrational energy, they are interesting systems to which the methodology could be applied. From this analysis, a heat diffusion profile from a thermophilic protein can be identified and compared to another from analogous mesophilic protein, in special, from the Family 11 Xylanases. Importantly, by revealing the mechanisms of anisotropic thermal diffusion of thermophilic proteins, new approaches to rational developing of proteins with modulated stability and activity can be suggested.

Keywords: Vibrational energy diffusion. Molecular dynamics. Thermal stability.

Referências

- 1 OTA, N.; AGARD, D. A. Intramolecular signaling pathways revealed by modeling anisotropic thermal diffusion. **Journal of Molecular Biology**, v. 351, n. 2, p. 345-354, 2005.

PG-56A - Estudo do efeito vascular da terapia fotodinâmica usando o modelo de membrana corioalantóica

BUZZA, Hilde Harb¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹

hilde.buzza@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Terapia Fotodinâmica (PDT, do inglês Photodynamic Therapy) é um tratamento de câncer que vem tendo grandes avanços ao longo dos anos (1). Para estudar os eventos vasculares durante esse tratamento, pode-se usar o modelo de Membrana Corioalantóica (CAM), que permite o estudo in vivo da angiogênese e anti-angiogênese (2). A PDT consiste na interação entre luz, uma substância fotossensibilizadora e a transformação do oxigênio molecular em oxigênio singlet, que é tóxico para a célula e leva à destruição do tecido(3). Nesse contexto, o uso do modelo de CAM permite o estudo individualizado do efeito vascular da PDT, auxiliando na análise do dano tecidual induzido, permitindo o estudo na variação de diversos parâmetros associados com a essa terapia e seus efeitos. Nossos resultados envolvem testes com Photogem® e Photodithazine® (administrados topicalmente) e os parâmetros variam entre 20-40 minutos para tempo de incubação e 0,5-10µg/cm² para concentração. Quanto à dose de luz, o intervalo dos testes variou entre 10-30 J/cm² com 100 mW/cm² para 635nm (Photogem®) e 660nm (Photodithazine®). São feitas fotos dos vasos até 300 minutos pós-terapia e, com softwares de processamento de imagem, há a transformação para preto e branco, sendo os pixels referentes aos vasos sanguíneos transformados em preto e o restante (clara, gema e embrião) em branco. Esse processo gera a porcentagem de pixels pretos e, consequentemente, a área de vasos sanguíneos em função do tempo pós-terapia, quantificando o efeito vascular da PDT. A variação e estudo desses parâmetros são usados para determinar o melhor ensaio em relação às características biofísicas e bioquímicas dos fotossensibilizadores e suas interações com o ambiente, com o objetivo de aperfeiçoar um já conhecido tratamento de câncer.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Membrana corioalantóica. Efeito vascular.

Referências

- 1 FINGAR, V. H. Vascular effects of photodynamic therapy. **Journal of Clinical Laser Medicine & Surgery**, v.15, n. 5, p. 323-328, 1996.
- 2 RIBATTI, D.; NICO, B.; VACCA, A.; RONCALI, L.; BURRI, P. H.; DJONO, V. Chorioallantoic membrane capillary bed: a useful target for studying angiogenesis and anti-angiogenesis in vivo. **The Anatomical Record**, v. 264, n. 4, p. 317-324, 2001.
- 3 NOWIS, D.; MAKOWSKI, M.; STOKISA, T.; LEGAT, M.; ISSAT, T.; GOLAB, J. Direct tumor damage mechanisms of photodynamic therapy. **Acta Biochimica Polonica**, v. 52, n. 2, p. 339-352, 2005.

PG-57A - Triagem de condições de cristalização da selenofosfato sintetase de *Escherichia coli*

SILVA, Ivan Rosa¹; FAIM, Livia Maria¹; BORGES, Julio Cesar²; THIEMANN, Otavio Henrique¹

ivan.silva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

Selênio é um micronutriente essencial e está presente em vários organismos em selenoproteínas, na forma de Selenocisteína, e em RNAs, como selenouridina (1, 2). A incorporação específica de selênio em proteínas e RNAs requer a formação de um composto de selênio biologicamente ativo, o monoselenofosfato, que é produzido através da ativação de seleneto com adenosina-5'-fosfato (ATP) em uma reação catalisada pela Selenofosfato Sintetase (SELD). Portanto, SELD é uma enzima chave no metabolismo do selênio na célula (3,4). A fase aberta de leitura da SELD de *E. coli* foi clonada em vetor de expressão pET28a (Novagen) e a proteína recombinante foi superexpressa em cepa *E. coli* BL21(DE3). A purificação do produto foi feita por meio de cromatografia de afinidade seguida de cromatografia de exclusão molecular. A triagem inicial de condições de cristalização da SELD de *E. coli* em concentrações de 5, 6 e 7 mg/ml foi feita em placas de cristalização com 96 poços a 20°C, através do método de difusão de vapor. Também foram realizados experimentos de cristalização na presença de ATP, ADP e AMPPcP. Ensaios de proteólise in-situ foram realizados para otimizar a cristalização. Primeiramente, testes de proteólise com uma variedade de proteases foram realizados para identificar uma protease capaz de gerar padrões de degradação estáveis, detectados por SDS-PAGE. A protease Quimiotripsina apresentou um padrão estável de degradação da SELD de *E. coli* e, portanto, foi adicionada aos ensaios de cristalização na concentração de 250 ug/ml. O produto de clivagem com Quimiotripsina também foi purificado por cromatografia de exclusão molecular e a amostra de proteína purificada foi submetida às mesmas condições de cristalização. Cristais na forma de agulha foram observados em algumas condições, que estão sendo otimizadas através de variação de pH e agente precipitante. Cristais selecionados foram testados para difração de raios-X na linha MX2 do Laboratório Nacional de Luz Sincrotron em Campinas-SP. Os cristais obtidos estão sendo otimizados de modo a se obter monocrystalis ideais para difração de raios-X.

Palavras-chave: Selenofosfato sintetase. *Escherichia coli*. Cristalização.

Referências

- 1 VERES, Z. et al. Selenoprotein synthesis in *E. coli*. purification and characterisation of the enzyme catalysing selenium activation. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States**, v. 89, n. 7, p. 2975–2979, 1992.
- 2 EHRENREICH, A. et al. Selenophosphate synthetase. enzyme properties and catalytic reaction. **European Journal of Biochemistry**, v. 206, n. 3, p. 767-73, 1992.
- 3 ITOH, Y. et al. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**, v. 285, n. 5, p. 1456-69, 2008.

PG-57B - Screening of crystallization conditions of selenophosphate synthetase from *Escherichia coli*

SILVA, Ivan Rosa¹; FAIM, Livia Maria¹; BORGES, Julio Cesar²; THIEMANN, Otavio Henrique¹

ivan.silva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

Selenium is an essential micronutrient and is present in several organisms as selenium-containing proteins in the form of selenocysteine and in RNAs as selenouridine (1, 2). Specific selenium incorporation into selenoproteins and RNAs requires the generation of a biologically active selenium donor compound, selenophosphate, which is produced from the activation of selenide with adenosine 5'-triphosphate (ATP) in a reaction catalyzed by Selenophosphate Synthetase (SELD). Therefore, SELD is a key enzyme of the selenium pathway in the cell (3, 4). The *Escherichia coli* SELD open reading frame was cloned into pET28a (Novagen) expression vector and the recombinant protein was over expressed in *E. coli* BL21(DE3) strain. In order to purify the product to homogeneity, we used metal-chelate affinity chromatography followed by a size exclusion chromatography step. We performed initial screening for crystallization conditions with SELD samples at 5, 6 and 7 mg/ml in 96-well sitting-drop crystallization plates at 20°C. We also tried protein co-crystallization experiments in the presence of ATP, ADP and AMPPcP. In situ proteolysis assays were also performed in order to improve the crystallization conditions. Investigative proteolysis with a panel of proteases was first used to identify a protease that generated promising degradation patterns, as detected by denaturing gel electrophoresis. Chymotrypsin showed the most stable product pattern and was added to the crystallization trials at 250 µg/ml. We also purified the product of Chymotrypsin reaction in size exclusion chromatography step and submitted the resulting protein sample, at 5 mg/ml, to the same crystallization conditions observing the formation of thin needles in some conditions. These conditions are been optimized through the variation of the buffer and precipitant agent. Selected small crystals were already tested for X-ray diffraction in the MX2 beamline at the Brazilian Synchrotron Laboratory (Campinas, SP). We are now working to improve the protein crystals obtained for structure determination.

Keywords: Selenophosphate synthetase. *Escherichia coli*. Crystallization.

References

- 1 VERES, Z. et al. Selenoprotein synthesis in *E. coli*. purification and characterisation of the enzyme catalysing selenium activation. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States**, v. 89, n. 7, p. 2975–2979, 1992.
- 2 EHRENREICH, A. et al. Selenophosphate synthetase. enzyme properties and catalytic reaction. **European Journal of Biochemistry**, v. 206, n. 3, p. 767-73, 1992.
- 3 ITOH, Y. et al. Structure of selenophosphate synthetase essential for selenium incorporation into proteins and RNAs. **Journal of Molecular Biology**, v. 285, n. 5, p. 1456-69, 2008.

PG-58A - Aplicação de drogas em tempo real e dependente do padrão a centros geradores de padrões

SANTOS, Jessica dos¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹

jessanti@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A maioria do estudos sobre o efeito de neurotransmissores em circuitos nervosos consiste em observar o comportamento dos neurônios quando submetidos a concentrações do modulador neural que se deseja estudar. Os sistemas neurais são submetidos, por um determinado período, a diferentes concentrações constantes da substância, seguido de um período de eliminação da mesma (*wash*) (1). Entretanto, durante o funcionamento normal de um sistema nervoso, a maioria dos neurônios não é submetida a neuromodulação ou à aplicação estacionária de neurotransmissores. O objetivo deste projeto de mestrado é usar técnicas da Física para estudar experimentalmente a influência dos neurotransmissores serotonina (5-HT) e glutamato. Para tal estudo utilizamos o sistema nervoso estomatogástrico (STNS) de *Callinectes sapidus* (gerador de padrão central – CPG pilórico) durante sua operação normal *in vitro*. O protocolo de estímulo sugerido será em tempo real e dependente do padrão produzido pelo próprio CPG. A utilização de um *picospritzer*, aparelho capaz de aspergir picolitros de drogas (2), tem como intuito mimetizar a liberação de neuromoduladores em um sistema nervoso *in vitro*, como ocorre *in vivo*. Tal aparelho, desenvolvido em nosso laboratório, possibilitou a injeção de ácido gama-aminobutírico (GABA - 5 µM) para testes preliminares. Os sinais extracelulares captados por eletrodos são amplificados e visualizados em um sistema de aquisição de dados. Esse sinal é passado para o *Dynamic Clamp* (3), o qual apresentará o padrão de injeção selecionado. Este pulso será transmitido para o *picospritzer*, que injetará solução contendo o neurotransmissor toda vez que o *Dynamic Clamp* encontrar este padrão pré-estabelecido. O projeto se encontra na aprendizagem de utilização do programa *Dynamic Clamp* para posterior aquisição dos dados e análise.

Palavras-chave: Gânglio estomatogástrico. Neurotransmissores. Dynamic clamp.

Referências

- 1 GRASHOW, R.; BROOKINGS, T.; MARDER, E. Reliable neuromodulation from circuits with variable underlying structure. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 106, n. 28, p. 11742-11746, 2009.
- 2 McCAMAN, R. E.; McKENNA, D. G.; ONO, J. K. A pressure system for intracellular and extracellular injections of picoliter volumes. **Brains Research**, Amsterdam, v. 136, n. 1, p. 141-147, 1977.
- 3 PINTO, R. D.; ELSON, R. C.; SZÜCZ, A.; RABINOVICH, M. I.; SELVERSTON, A. I.; ABARBANEL, H. D. I. Extended dynamic clamp: controlling up to four neurons using a singles desktop computer and interface. **Journal of Neuroscience Methods**, Amsterdam, v. 108, n. 1, p. 39-48, 2001.

PG-59A - Uma nova modificação cristalina do fármaco antirretroviral Lamivudina

TENORIO, Juan Carlos¹; ELLENA, Javier Alcides¹

juanct@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Lamivudina (3TC – β-L-2',3'-didesoxi-3'-tiocitidina) pertence à classe dos fármacos inibidores nucleosídeos da transcriptase reversa (INTR) e é de vital importância para o tratamento da AIDS, doença que afeta milhões de pessoas no mundo inteiro todos os anos. A busca por novas formas farmacêuticas que permitam o melhoramento da eficiência desse fármaco, ou seja, formas com melhor velocidade de dissolução e solubilidade são de grande interesse para a terapia antirretroviral. Nesse contexto, uma nova modificação cristalina foi obtida: um sal de nitrato de Lamivudina (3TC-NO₃), isto devido à capacidade de protonação do anel citosina presente na molécula de 3TC. A obtenção de cristais prismáticos permitiu a realização de medidas de difração de raios X de monocrystal (DRXM), tanto a temperatura ambiente quanto a 100.0(2)K. A molécula cristaliza no grupo espacial não-centrossimétrico P21, com duas moléculas do sal por cela unitária. A estrutura tridimensional apresenta semelhança com um nucleotídeo modificado pela presença do íon nitrato. A cela unitária é estabilizada por ligações clássicas fortes do tipo N-H...O entre a unidade catiônica de 3TC e o ânion de nitrato conformando cadeias em forma de ziguezague que correm ao longo do eixo b. Estas cadeias estão por sua vez entrelaçadas por interações não clássicas do tipo C-H..O que levam à formação de um empacotamento cristalino tridimensional. Esta nova modificação cristalina será posteriormente analisada utilizando técnicas complementares tais como DSC, TGA, IV e Raman. Ela também será submetida a estudos de solubilidade com o intuito de avaliar possíveis aplicações na terapêutica do AIDS.

Palavras-chave: Lamivudina-3TC. INTR. DRXM.

Referências

- 1 MARTINS, F. T. **Química supramolecular de fármacos antirretovirais inibidores nucleosídeos de transcriptase:** novas formas cristalinas e alteração de propriedades de estado sólido 2010. 268p. Tese (Doutorado em Ciência - Física Aplicada - opção Biomolecular) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 2 DE CLERQ, E. Anti HIV drugs: 25 compounds approved within 25 years after the discovery of HIV. **International Journal of Antimicrobial Agents**, v. 33, n. 4, p. 307-320, 2009.

PG-60A - Estrutura em complexo com tubercidina e constantes catalíticas da enzima Metiltioadenosina Fosforilase (MTAP) de *Schistosoma mansoni*

SOUZA, Juliana Roberta Torini de¹; DE MARCO, Ricardo¹; GARRATT, Richard Charles¹; PEREIRA, Humberto D'Muniz¹

jutorini@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Causada pelo parasita *Schistosoma mansoni*, a esquistossomose é uma doença crônica que afeta 200 milhões de pessoas no mundo sendo 6 milhões somente no Brasil (1). O parasita S. mansoni não possui a via de síntese de bases púricas e depende integralmente da via de salvação (2), por isso essa via é um alvo de interesse para o desenvolvimento de fármacos. A enzima MTAP catalisa a reação: 5'-metiltioadenosina (MTA) + fosfato = adenina + 5-metiltioribose (MTR) (3). A amplificação da MTAP foi feita utilizando biblioteca de cDNA feita a partir do mRNA total do verme adulto. A clonagem foi feita em pET28a e confirmada através da PCR das colônias. A proteína foi expressa e purificada por cromatografia de afinidade e dialisada em 20mM de Tris pH 7,4, 200mM de NaCl e 5mM β-mercaptoetanol. A proteína foi cristalizada em 100 mM Bis-tris com pH 6,1-6,5 e 14-18% de PEG3350. Os cristais obtidos foram submetidos à difração de raios X na linha I02 do Diamond Light Source em Oxford Inglaterra. Obteve-se 1 conjuntos de dados em complexo com tubercidina a 2,1 Å de resolução. A MTAP cristalizou no sistema monoclinico com o grupo espacial P21 com dimensões de cela a=81.06 Å, b=82.68 Å, c=150.56 Å. O refinamento encontra-se com Rwork(%) = 20,4 e Rfree(%) = 25,9. Foram realizados ensaios cinéticos para os substratos MTA e adenosina. Os ensaios mediram indiretamente a formação de adenina, através da formação de 2,8-dihidroxiadenina, produzido pela oxidação da adenina pela xantina oxidase (XO) a 305nm. A reação continha 100mM de tampão fosfato de potássio pH 7,4, 0,3 unidades de XO e 50 nM de SmMTAP. O ensaio foi iniciado pela adição do substrato em quantidades variáveis. A OD305nm foi imediatamente monitorada em UV-VIS espectofotômetro por 10 minutos. As constantes catalíticas obtidas para o substrato MTA foram: Km 3,12 μM (±0,16) e Kcat 32,56 s-1 (±0,55) com R2 99%. Para o substrato adenosina: Km 1,94 μM (±0,08) e Kcat 22,40 s-1 (±0,33) com R2 98%.

Palavras-chave: *Schistosoma mansoni*. Fosforilase. MTAP.

Referências

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION - **WHO Report of the scientific working group meeting on Schistosomiasis**. Special programme for research and training in tropical disease Geneva: WHO, 2006.
- 2 SENFT, A. W. et al. Purine metabolism in *Schistosoma mansoni*. **International Journal for Parasitology**, Rhode Island, v. 2, n. 2, p. 249-260, 1972.
- 3 PEGG, A. E.; WILLIAMS-ASHMAN, H. G. Phosphate-stimulated breakdown of 5'-methylthioadenosine by rat ventral prostate. **Biochemical Journal**, Great Britain, v. 115, n. 2, p. 241-247, 1969.

PG-61A - Caracterização de estado sólido do fármaco Estradiol 17 β Valerato

PAULA, Karina de¹; ELLENA, Javier Alcides¹

karina_depaula@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Hormônios tratam-se de substâncias químicas produzidas pelo organismo, responsáveis por controlar e regular a atividade de determinadas células ou órgãos (1). Um dos hormônios sexuais produzidos pelos folículos ovarianos, mas também em pequenas quantidades pelos testículos é o Estradiol 17 β Valerato ou (E2)(2), que é um estrogênio com início de produção na adolescência, responsável pelo desenvolvimento de sinais性 nas mulheres e pelas características que diferem homens de mulheres, tais como o estímulo da proliferação das células em determinadas regiões do corpo, como células de gorduras formadas no organismo mais presente em mulheres. Tal hormônio é utilizado farmacologicamente para o tratamento de sintomas de menopausa, bem como em contraceptivos hormonais (3). O objetivo deste trabalho foi analisar e caracterizar a forma sólida do E2 por difração de raios X de monocrystal (DRX), calorimetria diferencial de varredura (DSC) e termogravimetria (TG). Para isso foi necessária a obtenção de monocrystal de boa qualidade, obtidos por meio da técnica de evaporação lenta do solvente, solubilizando-se aproximadamente 0,005g de E2 em 1mL de isopropanol. A coleta de dados do cristal foi feita em um difratômetro Enraf-Nonius Kappa – CCD com temperatura de 298(2) K (4). Os dados cristalográficos revelaram que o E2 cristaliza no grupo espacial P21, no sistema cristalino monoclinico, com 4 moléculas por cela unitária. O estudo supramolecular mostrou que o empacotamento é estabilizado por interações intermoleculares clássicas do tipo O–H...O e não clássicas do tipo N–H...O, formando planos que se entrelaçam ao longo do eixo c. Essas análises pretendem-se entender as características de estado sólido deste composto para futuras aplicações no campo farmacêutico.

Palavras-chave: Estradiol 17 β Valerato. Estado sólido. Difração de raios-X.

Referências

- 1 CRISP, T. M.; CLEGG, E. D.; COOPER, R. L.; WOOD, W. P.; ANDERSON, D. G.; BAETCKE, K. P.; HOFFMANN, J. L.; MORROW, M. S.; RODIER, D. J.; SCHAEFFER, J. E.; TOUART, L. W.; ZEEMAN, M. G.; PATEL, Y. M. Environmental endocrine disruption: an effects assessment and analysis. **Environmental Health Perspectives**, v. 106, p. 11–56, 1998. Supplment 1.
- 2 WU C. H.; MOTOHASHI T.; ABDEL-RAHMAN H. A.; FLICKINGER G. L.; MIKHAIL, G. Free and protein-bound plasma estradiol-17 beta during the menstrual cycle. **Journal of Clinical Endocrinology & Metabolism**, v. 43, n. 2, p. 436–45, 1976.
- 3 FONSECA, A. M.; CAVALCANTI, A . L.; BAGNOLI, V. R.; PAIXÃO, J. S.; PENTEADO, S. R. L.; CARDOSO, E. B.; BARACAT, E. C. Effects of estradiol valerate associated with cyproterone acetate on some clinical and sexuality-related aspects in postmenopausal women. **Einstein**, v. 6, n. 2, p.170-4, 2008.
- 4 Enraf-Nonius. **Diffractometer Kappa – CCD**, Nonius BV; Delft: The Netherlands. 1999.

PG-62A - Avaliação da terapia fotodinâmica em lesões cutâneas e subcutâneas de pitiose experimental em coelhos

PIRES, Layla¹; BOSCO, Sandra de Moraes Gimenes²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; KURACHI, Cristina¹

laylapires@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Biociências de Botucatu - Universidade Estadual Paulista

A terapia fotodinâmica é uma modalidade terapêutica baseada na interação entre uma substância fotossensibilizadora e luz, na presença do oxigênio, para causar morte celular. Através de irradiação de comprimento de onda específico, o fotossensibilizador é excitado e reage com oxigênio celular, dando origem a espécies reativas de oxigênio capazes de promover danos a biomoléculas da célula-alvo. O mesmo processo ocorre para micro-organismos, como bactérias, vírus e fungos seja em modelos *in vitro* ou *in vivo* como em infecções cutâneas (1). A Pitiose é uma doença causada por um micro-organismo semelhante a fungo denominado *Pythium insidiosum*, caracterizada por lesões extensas com aspecto granulomatoso. Por não ser um fungo verdadeiro, o agente não responde à maioria das drogas antifúngicas disponíveis, tornando difícil o tratamento da doença (2). Procedimentos cirúrgicos extensos, como amputação de membros, são indicados; porém as recidivas são freqüentes. Neste trabalho, foi avaliado o efeito da Terapia Fotodinâmica em modelo de infecção experimental de pitiose em coelhos (3). Foram avaliados dois fotossensibilizadores, Photogem e Photodithazine na concentração de 1,5 e 1,0mg/kg do animal, respectivamente. Espectroscopia de fluorescência foi realizada a fim de identificar a presença dos fotossensibilizadores na lesão do animal. Como se trata de um projeto piloto fixou-se a dose energética em 130J/cm². Os resultados obtidos até o presente momento demonstram que o Photodithazine é o fotossensibilizador mais indicado para o tratamento da pitiose, uma vez que foi observado consumo da droga, o que significa que houve reação fotodinâmica. Além disso, houve redução no tamanho das lesões. Novos ensaios ainda serão realizados, bem como avaliação de outros protocolos de tratamento. Ainda que preliminares estes resultados mostram-se promissores e podem vir a representar uma ferramenta eficaz no tratamento de lesões cutâneas e subcutâneas de pitiose.

Palavras-chave: Pitiose. Terapia fotodinâmica. Controle microbiano.

Referências

- 1 CALZAVARA-PINTON P. G.; VENTURINI, M; SALA, R. A comprehensive overview of photodynamic therapy in the treatment of superficial fungal infections of the skin. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: biology**, v. 78, n. 1, p. 1-6, 2005.
- 2 ALLISON, N.; GILLIS, J. P. Enteric pythiosis in a horse. **Journal of the American Veterinary Medical Association**, v. 196, n. 3, p. 462-464, 1990.
- 3 MILLER, R. I.; CAMPBELL, R. S. F Experimental Pythiosis in Rabbits. **International Society for Human and Animal Mycology**, v. 21, n. 4, p. 331-341, 1983.

PG-63A - Cultivo e seleção de bactérias anaeróbias termofílicas fermentadoras a partir de amostras de reservatórios de petróleo

GODOI, Leandro Bardiviesso¹; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini¹

bardiviesso@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Reservatórios de petróleo são ambientes únicos por apresentarem uma combinação de condições ambientais extremas, no que se refere, por exemplo, à temperatura, pressão e salinidade. Uma grande variedade de espécies de bactérias tem sido isolada de reservatórios de petróleo, muitas das quais são descritas como sendo nativas desse ambiente. Os dados disponíveis sugerem que somente os micro-organismos anaeróbios estritos podem ser considerados como verdadeiramente nativos do reservatório (1), destacando-se as bactérias fermentativas, redutoras de sulfato e árqueas metanogênicas. Dentre as bactérias fermentativas anaeróbias, os isolados termofílicos são os mais estudados, provavelmente porque a maioria dos reservatórios de petróleo ocorre em profundidades onde a temperatura é alta e também porque os microrganismos termofílicos possuem enzimas termoestáveis de grande interesse em processos industriais. A análise dos micro-organismos desses ambientes se faz por meio da coleta de fluidos (mistura de água e óleo) de poços de produção ou, quando é possível, a partir de fragmentos da rocha formadora de óleo do reservatório. Neste contexto, o presente projeto definiu como objetivo isolar espécies bacterianas conhecidas por produzirem enzimas degradadoras de polissacáideos de interesse comercial, por meio do cultivo em meios líquidos seletivos e em condições de reservatório (alta temperatura, alta salinidade, anaerobiose). Espécies bacterianas isoladas deste tipo de ambiente, como *Thermotoga spp* e *Petrotoga spp*, produzem enzimas termoestáveis que têm aplicações industriais, como por exemplo as dextranases e xilanases. Amostras dos fluidos de produção de 3 poços de um reservatório terrestre de petróleo serão analisadas quanto ao objetivo proposto. Análises moleculares e de cultivo das amostras destes poços, realizadas em projeto anterior, detectaram a presença do gênero *Petrotoga*, indicando a necessidade da padronização de métodos para seleção e isolamento deste e de outros gêneros da mesma ambiente.

Palavras-chave: Bactérias termofílicas. Petróleo. Enzimas termoestáveis.

Referências

- 1 MAGOT, M.; OLLIVIER, B.; PATEL, B. K. C. Microbiology of petroleum reservoirs. *Antoine van Leeuwenhoek*, v. 77, n. 2, p. 103-116, 2000.

PG-64A - Dinâmica molecular e redes complexas no estudo de proteínas termoestáveis

CENSONI, Luciano Borges¹; MARTÍNEZ, Leandro¹

luciano.censoni@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

No mercado global crescente de substratos biotecnológicos, as xilanases se destacam como enzimas chave em áreas de importância estratégica tal como a produção de Biocombustíveis (1). Muitos dos processos industriais que empregam xilanases podem ser tornados mais eficientes e economicamente mais vantajosos por meio da utilização de enzimas de origem termofílica e hipertermofílica (1). Contudo, os mecanismos moleculares por detrás da estabilização térmica em xilanases da família 11 ainda não são bem caracterizados ou entendidos (2). Neste trabalho, investigamos os mecanismos que conferem estabilidade térmica a algumas xilanases termofílicas da família 11, por meio de simulações de dinâmica molecular e análise através da perspectiva da teoria de redes complexas (3). Assim, identificamos e caracterizamos a importância de cada resíduo de aminoácido para a difusão energética e estabilização da proteína como um todo, possibilitando a proposição de estratégias de engenharia de proteínas com o objetivo de melhorar sua estabilidade térmica.

Palavras-chave: Dinâmica molecular. Xilanase. Redes complexas.

Referências

- 1 COLLINS, T.; GERDAY, C.; FELLER, G. Xylanases, xylanase families and extremophilic xylanases. **FEMS Microbiology Reviews**, v. 29, p. 3–23, 2005.
- 2 DUMON, C.; VARVAK, A.; GILBERT, H. J. Engineering hyperthermostability into a GH11 xylanase is mediated by subtle changes to protein structure. **Journal of Biological Chemistry**, v. 283, n. 33, p. 22557–22564, 2008.
- 3 VENDRUSCOLO, M.; DOKHOLYAN, N. V.; KARPLUS, M. Small-world view of the amino acids that play a key role in protein folding. **Physical Review E**, v. 65, p. 061910, 2002.

PG-64B - Molecular dynamics and complex networks in the study of protein stability

CENSONI, Luciano Borges¹; MARTÍNEZ, Leandro¹

luciano.censoni@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

In the growing global market for biotechnological substrates, Xylanases stand out as key enzymes in fields of strategic importance such as Biofuel production (1). Many of the industrial processes which employ Xylanases can be made more efficient and economically more advantageous by utilizing enzymes of thermophilic and hyperthermophilic origin (1). However, the molecular mechanisms underlying thermal stabilization in Family 11 Xylanases are not well characterized or understood as of yet (2). Here, we investigate the mechanisms which confer thermal stability to some thermophilic family 11 xylanases, through Molecular Dynamics simulations and analysis from the perspective of Complex Networks Theory (3). By this, we identify and characterize the importance of each amino acid residue for energy diffusion and stabilization of the protein as a whole, enabling the proposal of protein engineering strategies for enhancing thermal stability.

Keywords: Molecular dynamics. Xylanase. Complex networks.

Referências

- 1 COLLINS, T.; GERDAY, C.; FELLER, G. Xylanases, xylanase families and extremopholic xylanases. **FEMS Microbiology Reviews**, v. 29, p. 3–23, 2005.
- 2 DUMON, C.; VARVAK, A.; GILBERT, H. J. Engineering hyperthermostability into a GH11 xylanase is mediated by subtle changes to protein structure. **Journal of Biological Chemistry**, v. 283, n. 33, p. 22557–22564, 2008.
- 3 VENDRUSCOLO, M.; DOKHOLYAN, N. V.; KARPLUS, M. Small-world view of the amino acids that play a key role in protein folding. **Physical Review E**, v. 65, p. 061910, 2002.

PG-65A - Estudos biofísicos e bioquímicos da celulase Celobiohidrolase II de *Trichoderma harzianum* 3844

VOLTATODIO, Maria Luiza¹; POLIKARPOV, Igor¹

malu.voltatodio@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O esgotamento das reservas de combustíveis fósseis, aliado à crescente demanda energética mundial e à necessidade de reduzir as emissões de carbono na atmosfera, mostram a necessidade da busca por novas fontes de energias limpas (1). O uso de resíduos como o bagaço de cana em bioprocessos é uma alternativa á produção de energia com base em biomassa. A tecnologia mais promissora para a conversão dessa biomassa lignocelulósica á etanol combustível tem como base a degradação enzimática da celulose (2), realizada por ação sinérgica de pelo menos três celulases: endoglucanases, celobiohidrolase e β-glucosidase (3), que atuam em regiões específicas da celulose. Entre os principais produtores de celulases, destacam-se os fungos filamentos. Neste trabalho, o extrato enzimático do fungo *Trichoderma harzianum* obtido por fermentação submersa em bioreatores, foi filtrado e concentrado por sistema tangencial. A enzima Celobiohidrolase II foi purificada por técnicas de cromatografia líquida utilizando colunas de troca iônica e interação hidrofóbica. Com a proteína pura foram realizados testes para determinação de pH e temperatura ótimos; eletroforese capilar; ensaios biofísicos de Dicroísmo Circular (CD) e Fluorescência e Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo (SAXS). Os resultados de pH e temperatura ótimos foram obtidos por metodologia de superfície de resposta, que mostraram como ponto ótimo temperatura de 60°C e pH 4,8. Na eletroforese capilar, a hidrólise do substrato mais simples contendo 5 glicoses, mostrou no final apenas moléculas com uma unidade de glicose. Análises de CD em pH 5,0 mostraram um padrão com dois mínimos característicos de estruturas compostas majoritariamente por alfa-hélices. O espectro de emissão da CBHII mostrou um comprimento de onda de fluorescência máxima a 333nm (pH5,0) após excitação a 295nm, indicando que os triptofanos estão expostos ao solvente. O modelo de SAXS mostrou uma estrutura tridimensional com dois domínios globulares unidos por um linker, corroborando com as demais celulases, que apresentam domínio catalítico e domínio de ligação à celulose.

Palavras-chave: *Trichoderma harzianum*. Celobiohidrolase II. Etanol lignocelulósico.

Referências

- 1 SALLA, D. A. **Análise energética de sistemas de produção de etanol de mandioca, cana-de-açúcar e milho.** 2008. 168 p. Tese (Doutorado em Energia na Agricultura) - Faculdade de Ciência Agronômicas, Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2008.
- 2 AHMED, S. A.; BASHIR, H.; SALEEM, M.; SAADIA; JAMIL, A. Production and purification of cellulose-degrading enzymes from a filamentous fungus *Trichoderma harzianum*. **Pakistan Journal of Botany**, v. 41, n. 3, p. 1411-1419, 2009.

- 3 BHAT, M. K.; BHAT, S. Cellulose degrading enzymes and their potential industrial applications. **Biotechnology Advances**, v. 15, n. 3-4, p. 583-620, 1997.

PG-66A - Triagem virtual de candidatos a novos inibidores da enzima cruzaína de *Trypanosoma cruzi*

SOUZA, Mariana Laureano de¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

marianalaureano@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A doença de Chagas é um problema grave de saúde pública com consequências devastadoras em termos de morbidade e mortalidade humana (1). O arsenal terapêutico contra a doença é limitado e insuficiente em todos os aspectos clínicos. Visando o desenvolvimento de novos agentes antichagásicos, diversas proteínas do parasita foram validadas como alvos terapêuticos. A enzima cruzaína, uma cisteíno-protease envolvida em todos os estágios de desenvolvimento e diferenciação do *Trypanosoma cruzi*, foi selecionada para os nossos estudos (2). Um método bastante utilizado na identificação e otimização de inibidores enzimáticos é o planejamento de fármacos baseado na estrutura do receptor (Structure Based Drug Design - SBDD) (3). Esta metodologia engloba diversas técnicas computacionais que utilizam estruturas cristalográficas de proteínas alvo, disponíveis no Protein Data Bank - PDB, para o planejamento racional de ligantes. Entre as técnicas modernas utilizadas, destacamos a triagem virtual, que possibilita identificar e selecionar novas moléculas candidatas a inibidores, a partir de grandes bases de dados de compostos. Estruturas da cruzaína em complexo com ligantes permitiram a aplicação de métodos de SBDD na seleção de uma nova série de candidatos a inibidores da enzima alvo. Um conjunto de aproximadamente 3,4 milhões de compostos com características moleculares apropriadas para a descoberta de candidatos a compostos líderes (lead-like), comercialmente disponíveis, foi selecionado do banco de dados ZINC (4). Os programas DOCK, GOLD e Surflex foram empregados na triagem virtual. Os resultados do programa DOCK foram utilizados como um filtro para a seleção de compostos a serem docados pelos programas GOLD e Surflex, restringindo para cerca de 35.000 o número de moléculas avaliadas por estes programas. As 500 moléculas com melhor pontuação em cada programa foram analisadas visualmente, considerando as características dos subsítios da enzima. Assim, 30 compostos foram selecionados para posterior estudo das interações intermoleculares e avaliação biológica.

Palavras-chave: *Trypanosoma cruzi*. Cruzaína. Triagem virtual.

Referências

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. Report of the first meeting of WHO strategic and technical advisory group on neglected tropical diseases. Disponível em: <http://www.who.int/neglected_diseases/NTD_STAG_Report_2011.pdf>. Acesso em: setembro 2009.
- 2 CAZZULO, J. J.; STOKA, V.; TURK, V. The major cysteine proteinase of *Trypanosoma cruzi*: a valid target for chemotherapy of Chagas disease. **Current Pharmaceutical Design**, v. 7, n. 12, p. 1143-1156, 2001.

3 ANDRICOPULO, A. D.; SALUM, L. B.; ABRAHAM, D. J. Structure- and ligand-based drug design: advances and perspectives. **Current Topics in Medicinal Chemistry**, v. 9, n. 9, p. 754-755, 2009.

4 IRWIN, J. J.; SHOICHEK, B. K. ZINC - a free database of commercially available compounds for virtual screening. **Journal of Chemical Information and Modeling**, v. 45, n. 1, p. 177-182, 2005.

PG-67A - Avaliação bioquímica de uma série de derivados de chalconas e semicarbazonas candidatos a inibidores de cruzaína

LEITE, Mariane¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

marianeleite@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Doença de Chagas pode ser considerada parasitose ocasionada pelo protozoário hemoflagelado *Trypanosoma cruzi* que atinge países da América Latina, acometendo entre 16-18 milhões de indivíduos e com cerca de 50 mil mortes ao ano (1). A quimioterapia disponível para o tratamento é composta por dois fármacos, benznidazol ou nifutimox, os quais apresentam sérios efeitos adversos e são pouco ativos na fase crônica da doença, tornando necessária a identificação de alvos moleculares e o desenvolvimento de novos fármacos contra a doença. A busca de novos agentes quimioterápicos envolve a seleção de alvos bioquímicos exclusivos do parasita. Nesse contexto a cruzaína, uma cisteíno-protease envolvida em vários estágios de desenvolvimento e diferenciação do *T. cruzi* e também na invasão e modificação da resposta imune do hospedeiro, é considerada um alvo promissor no planejamento de inibidores candidatos a agentes antichagásicos (2). Os compostos das chalconas e semicarbazonas apresentam interessante atividade inibitória da cruzaína de *T. cruzi*. No presente trabalho identificou-se uma série de compostos derivados de chalconas e semicarbazonas como promissores inibidores de cruzaína. Medidas de cinética enzimática foram realizadas a 30°C usando um espectrofluorímetro com comprimento de onda de 380 nm em excitação e 460 nm em emissão. A atividade enzimática é verificada pela clivagem do substrato fluorescente Z-Phe-Ala-AMC (3). A atividade dos inibidores foi medida por meio da fluorescência remanescente em relação à atividade da enzima sem inibidor. A potência dos compostos foi determinada pela concentração inibitória de 50% de cruzaína (IC₅₀) e os compostos apresentaram uma atividade inibitória no intervalo de 25-95% em 100µM. A identificação desta série de chalconas permitirá a evolução dos estudos para a determinação da potência, afinidade e mecanismo de inibição desses compostos.

Palavras-chave: Doença de Chagas. Cruzaína. Chalconas.

Referências

- 1 BORCHHARDT, D. M.; MASCARELLO, A.; CHIARADIA, L. D.; NUNES, R. J.; OLIVA, G.; YUNES, R. A.; ANDRICOPULO, A. D. Biochemical evaluation of a series of synthetic chalcone and hydrazide derivatives as nivel Inhibitors of Cruzain from *Trypanosoma cruzi*. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 21, p. 142-150, 2010.
- 2 SAJID, M.; MCKERROW, J. H. Cysteine proteases of parasitic organisms. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v.120, n. 1, p.1-21, March 2002.
- 3 ZANATTA, N. et al. Synthesis and characterization of some novel 2-(Trifluoromethyl)pyrimido[1,2-a]benzimidazoles and Pyrimido[1,2-a]benzimidazol-2H)-ones of biological interest. **Synthesis**, v. 14, p. 2305-2312, 2006. DOI: 10.1055/s-2006-942444.

PG-68A - Compreensão da estrutura de proteínas por estudantes de nível superior, na perspectiva dos modelos mentais

SILVA, Marília Faustino da¹; BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini¹

marilia.silva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Biologia Molecular e a Biotecnologia, e seus conceitos subjacentes, estão inseridos no currículo escolar da educação básica e têm estado mais presentes na vida cotidiana, trazendo à tona aspectos éticos envolvidos na produção e aplicação do conhecimento científico e tecnológico, chamando à reflexão para a análise e tomada de decisão, tanto para estudantes que prosseguirão seus estudos em carreiras relacionadas quanto para aqueles que não vão. As explicações de alguns fenômenos e processos relacionados a estes temas estão quase sempre no nível molecular e atômico, que não pode ser observado, mas que é descrito e explicado com modelos conceituais e físicos, ou através de imagens. À luz da Teoria dos Modelos Mentais de Johnson-Laird (1), algumas pessoas raciocinam com imagens, usando-as em seus modelos, fazendo rotações, translações e expansões; entretanto, nem todas utilizam este processo de pensamento, pois têm dificuldade de inferir a estrutura tridimensional a partir de figuras estáticas, diagramas bidimensionais e fotos usadas em livros didáticos ou projetadas em telas. Nesse contexto propõe-se a avaliar a contribuição do material didático “Construindo modelos de aminoácidos e proteínas” (2) para o ensino e aprendizagem da estrutura e função de proteínas de alunos do ensino superior. Para tal, delineou-se a pesquisa nas seguintes etapas: levantamento dos modelos mentais presentes no público alvo, elaboração de uma intervenção didática sobre o tema, escolha dos instrumentos de coleta de dados, aplicação da intervenção com o público alvo e análise de representações e modelos mentais dos alunos bem como contribuição do material para os modelos mentais detectados. Este trabalho se encontra na etapa testagem dos instrumentos de coleta de dados e da intervenção didática, necessária para adequar as atividades à realidade dos alunos e analisar a viabilidade da utilização dos instrumentos adotados. Assim, foi possível rever fatores como (a) o tempo previsto para as atividades da intervenção e (b) o grau de aprofundamento no tema durante a intervenção didática.

Palavras-chave: Proteínas. Modelos mentais. Ensino superior.

Referências

- 1 JOHNSON-LAIRD, P. N. **Mental models**. Cambridge: Harvard University Press, 1983. 513p.
- 2 SILVA, A. R. **Desenvolvimento e avaliação de modelos representativos para a construção de aminoácidos e de estruturas de proteína**. 2010. 166 p. Tese (Doutorado em Física Aplicada - Opção Biomolecular) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos. 2010.

PG-69A - Estudos funcionais e estruturais da classe de enzimas endoglucanase GHF45 aplicados ao desenvolvimento de coquetéis enzimáticos

RAMIA, Marina Paglione¹; LANDGRAFF, Ana Carolina Mafud¹

ramia@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Glicosil hidrolases são uma classe de enzimas capazes de catalisar a hidrólise de ligações glicosídicas entre polímeros de glicose ou entre uma glicose e outra molécula não polissacarídica. Hoje são conhecidas 125 famílias de glicosil hidrolases, que na maioria dos casos tem como mecanismo de ação a hidrólise da ligação glicosídica catalisada por dois resíduos de aminoácidos da enzima: um ácido geral e um nucleófilo. Dependendo da posição espacial desses resíduos catalíticos, a hidrólise ocorre através de retenção total ou inversão geral da configuração anomérica (1). As celulases se diferenciam das outras glicosil hidrolases por hidrolisar ligações β -1,4 entre resíduos de glicose (2). A hidrólise da celulose resultando em monômeros de glicose é realizada por sistemas enzimáticos que geralmente incluem três tipos de enzimas que diferem com base no modo de catálise da celulose, mas agem sinergisticamente: endo-1,4- β -glucanase, exo-1,4- β -glucanase ou celobiohidrolase, e celobiase ou β -glucosidase (3). As endo-glucanases atacam a parte amorfa da celulose através da clivagem das ligações internas nas microfibrilas, diminuindo o tamanho da cadeia, gerando oligossacarídeos de diferentes tamanhos e novas extremidades livres, água e celooligossacarídeos que serão hidrolisados formando celobiose e glicose. A família 45 das glicosil hidrolases utilizam a inversão como mecanismo de hidrólise. Compartilham de um domínio catalítico pequeno (20 kDa) e grande variedade de substratos, como a celulose e seus derivados (4). Essa classe de enzimas tem sido bem caracterizada do ponto de vista funcional, entretanto, poucas estruturas foram resolvidas, o que dificulta o entendimento de seu mecanismo de ação. A fim de sanar essa lacuna, propõe-se neste trabalho o estudo estrutural das endo-glucanases, de modo que o conhecimento do comportamento do microorganismo durante o processo de fermentação, assim como a sua ação enzimática, torne possível o aprimoramento de métodos; a otimização; modificação e controle de processos.

Palavras-chave: Endoglucanase. Etanol lignocelulósico. Caracterização estrutural.

Referências

- 1 CANTAREL, B. L. et al. The carbohydrate-active enzymes database (CAZy): an expert resource for glycogenomics. **Nucleic Acids Research**, v. 37, p. D233-D238, Jan. 2009. DOI:10.1093/nar/gkn663.
- 2 LYND, L. R. et al. Microbial cellulose utilization: fundamentals and biotechnology. **Microbiology and Molecular Biology Reviews**, v. 66, n. 3, p. 506-577, 2002. DOI: 10.1128/MMBR.66.3.506-577.2002.
- 3 FELIX,C. R.; LJUNGDHAL, L. G. The cellulosome: the exocellular organelle of clostridium. **Annual Review of Microbiology**, v. 47, p. 791-819, 1993. DOI:



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

10.1146/annurev.mi.47.100193.004043.

4 IGARASHI, K. et al Characterization of endoglucanase belonging to new subfamily of glycoside hydrolase family 45 from the basidiomycete Phanerochaete chrysosporium. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 74, n. 18, p. 5628-34, 2008. DOI: 10.1128/AEM.00812-08.

PG-70A - Caracterização molecular e atividade catalítica da mevalonato kinase de tripanossoma cruzi

DERIGGI, Maycou Alberto¹; HORJALES REBOREDO, Eduardo¹; MORTARA, Renato A.²; BAHIA, Diana²; FERREIRA, Éden R.²

maycouderiggi@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - USP - Universidade de São Paulo

² Instituto de Microbiologia, Imunologia e Parasitologia - Unifesp - Universidade Federal de São Paulo

Em células eucarióticas, esteróis são importantes determinantes da fluidez e permeabilidade da membrana. São também precursores de moléculas bioativas, com função regulatória do ciclo e desenvolvimento celular. A importância dos esteróis de tripanossomatídeos foi provada e existem alguns inibidores que atuam em diferentes pontos da via (1). A Mevalonato Kinase (MK) desempenha um papel central na via de biossíntese de colesterol, catalizando a fosforilação do ácido mevalônico para 5-fosfo-mevalonato. Recentemente, estudos sobre a MK mostram que quando tripanossomatídeos invadem as células hospedeiras, essa enzima é observada em abundância. Portanto isso sugere a importância dessa enzima como futuro alvo para desenvolvimento de fármacos. Apesar de apenas a caracterização estrutural da MK de *Leishmania major* ser conhecida, ainda não houve estudos capaz de caracterizar a MK de *Tripanossoma cruzi* (TcMK). Neste trabalho reportamos estudos preliminares de caráter bioquímico e estrutural sobre a TcMK. Essa foi clonada no vetor pET28-a(+), mostrando uma satisfatória expressão em E.coli à 22° C no meio de cultura ZYM-5052 (meio de autoindução) (2). No processo de purificação, dado que o pET28 introduz uma calda de 6 histidinas, utilizou-se como primeira etapa uma coluna de afinidade de Níquel. A cromatografia por exclusão molecular (SEC) foi fundamental para a determinação e separação dos diferentes estados oligoméricos da proteína. Essa técnica identificou dois estados oligoméricos presentes na amostra. Estes oligômeros da proteína TcMK foram usados para ensaios de atividade, sugerindo que a enzima é ativa principalmente na conformação dimérica. A atividade específica foi determinada pelo dímero em pH 9.0, resultando em $80 \pm 20 \mu\text{M}/\text{min}$ de produto convertidos por miligrama de enzima. A amostra monomérica apresentou uma atividade catalítica inferior em dez vezes, no limite inferior de detecção do ensaio. Experimentos de cristalização estão sendo realizados com o objetivo de se obter cristais para obtenção de modelo estrutural da MK.

Palavras-chave: Esteróis. Atividade específica. Cristalografia.

Referências

- 1 CARRERO-LERIDA, J. et al. Intracellular location of the early steps of the isoprenoid biosynthetic pathway in the trypanosomatids *Leishmania major* and *Trypanosoma brucei*. **International Journal for Parasitology**, v. 39, n. 3, p. 307-14, 2009.
- 2 STUDIER, F. W. Protein production by auto-induction in high-density shaking cultures. **Protein Expression and Purification**, v. 41, n. 1, p. 207 - 234, 2005.

PG-71A - Estudo espectroscópico e termodinâmico da correlação estrutura-função da enzima Clorocatecol 1,2-dioxigenase de *Pseudomonas putida*

MESQUITA, Nathalya Cristina de Moraes Roso¹; DYSZY, Fábio¹; COSTA FILHO, Antonio José da.¹

nathy_physics@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Dioxigenases são enzimas responsáveis pela degradação do anel aromático de compostos halogenados, os quais são despejados rotineiramente no ambiente através de ações antropogênicas (1). Dentre essa família de enzimas, a clorocatecol 1,2-dioxigenase de *Pseudomonas putida* (Pp 1,2-CCD) é uma enzima intradiol que possui em sua estrutura, recém determinada, dois sítios catalíticos e um sítio hidrofóbico, assim como em outras enzimas da mesma família com estruturas semelhantes (2-5). Neste último, foi encontrado uma densidade de cargas compatível a uma molécula de fosfolipídio/ácido graxo, o qual acredita-se que regule a atividade catalítica da Pp 1,2-CCD(6). É neste âmbito que o presente trabalho pretendeu contribuir através da realização de estabelecimento de protocolos de delipidação, com seqüente quantificação de estrutura secundária e experimentos de cinética enzimática, de interação com modelos membranares e desenovelamento térmico através do uso de técnicas espectroscópica de dicroísmo circular, ressonância paramagnética eletrônica, absorção ótica e calorimetria diferencial de varredura.

Palavras-chave: Dioxigenase. Termodinâmica. Espectroscopia.

Referências

- 1 BRODERICK, J. B.; O'HALLORAN, T. V. Overproduction, purification and characterization of chlorocatecol dioxygenase, a non-heme iron dioxygenase with broad substrate tolerance. **Biochemistry**, v. 30, n. 29, p. 7349-7358, 1991.
- 2 VETTING, M. W.; ORLENDORF, D. H. The 1.8 angstrom crystal structure of catechol 1,2-dioxigenase reveals a novel hydrophobic helical zipper as a subunit linker. **Structure**, v. 8, n. 4, p. 429-440, 2000.
- 3 EARHART, C. A.; VETTING, M. W.; GOSU, R.; MICHAUD-SORET, I.; QUE, L.; OHLENDORF, D. H. Structure of catechol 1,2-dioxigenase from *Pseudomonas arvillae*. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, v. 338, n. 1, p. 198-205, 2005.
- 4 FERRARONI, M.; KOLOMYTSEVA, M. P.; SOLYANIKOVA, I. P.; SCOZZAFAVA, A.; GOLOVLEVA, L. A; BRIGANTI, F. Crystal structure of 3-chlorocatechol 1,2-dioxigenase key enzyme of a new modified ortho-pathway from the gram-positive *Rhodococcus opacus* 1CP grown on 2-chlorophenol. **Journal of Molecular Biology**, v. 360, n. 4, p. 788-799, 2006.

5 FERRARONI, M. SOLYANIKOVA, I. P; KOLOMYTSEVA, M. P; SCOZZAFAVA, A.; GOLOVLEVA, L.; BRIGANTI, F. Crystal structure of 4-chlorocatechol 1,2-dioxygenase from the chlorophenol-utilizing gram-positive *Rhodococcus opacus* 1CP. **Journal of Biological Chemistry**, v. 279, n. 26, p. 27646-27655, 2004.

6 RUSTIGUEL, J. K. R.; PINHEIRO, M. P. ; ARAUJO, A. P. U. ; NONATO, M. C. Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of recombinant chlorocatechol 1,2-dioxygenase from *pseudomonas putida*. **Acta Crystallographica F**, v. 67, n. 4, p. 507-509, 2011. DOI: 10.1107/S174430911100635X.

PG-72A - Fabricação de micro-ambientes para a investigação de crescimento e diferenciação celular

SALAS, Oriana Inés Avila¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹

oriana@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Microfabricação a laser utilizando polimerização via absorção de dois fótons é uma técnica bastante promissora para a fabricação de sistemas de entrega de fármacos, matrizes para engenharia de tecidos e implantes médicos (1) com uma maior variedade de tamanhos, formas e materiais do que os convencionalmente utilizados. Neste trabalho, nós propomos usar um laser pulsado de femtossegundos para fabricar micro-ambientes, através da fotopolimerização via absorção de dois fótons, os quais serão utilizados para investigar o crescimento e a diferenciação celular. A fotopolimerização induzida por absorção de dois fótons será realizada utilizando um oscilador laser de Ti: safira que produz pulsos de 130 fs em 800 nm. Neste sistema, a amostra é varrida no plano xy pelo feixe laser através de um conjunto de espelhos galvanométricos, enquanto o movimento na direção z se dá através de um estágio de translação. O feixe laser será focalizado na amostra utilizando uma objetiva do microscópio com abertura numérica 0.65. As microestruturas produzidas por este método nos permitirão realizar um estudo sistemático do crescimento celular e testes para engenharia de tecidos. Na primeira fase do projeto nos dedicaremos ao desenvolvimento do sistema de microfabricação, de acordo com as características necessárias para os estudos em células que serão feitos na sequência.

Palavras-chave: Fotopolimerização. Absorção de dois fótons. Crescimento celular.

Referências:

- 1 OVSIANIKOV, A. et al. Two-photon polymeration technique for microfabrication of CAD-designed 3D scaffolds from commercially available photosensitive materials. **Journal of Tissue Engineering and Regenerative Medicine**, Hoboken, NJ, v. 1, n. 6, p. 443-449, 2007. DOI: 10.1002/term.57.

PG-73A - Desenvolvimento de estímulos dinâmicos térmicos para análise do sistema sensorial infravermelho em serpentes

BATISTA, Renata da Fonseca Moraes¹; SLAETS, Jan Frans Willem¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹; ANDRADE, Denis O. Vieira de²
tata.fis@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos-IFSC - Universidade de São Paulo-USP

² Departamento de Zoologia-Campus Rio Claro - Universidade Estadual Paulista-UNESP

O presente trabalho visa desenvolver um conjunto de estímulos artificiais a serem utilizados no estudo do sistema sensorial infravermelho em serpentes. Pretende-se medir a influência de contraste e movimento, bem como pulsações de temperatura simulando a corrente sanguínea de falsas presas no nervo que conecta os sensores de detecção infravermelho da serpente até o córtex. Todos os animais homeotérmicos (aves e mamíferos) emitem radiação infravermelha na faixa de 10.000nm (1). As serpentes apresentam duas cavidades entre as narinas e os olhos, a chamada fosseta loreal. Essas aberturas são recobertas por uma membrana inervada, que fazem parte do nervo trigêmeo, cuja terminações nervosas percebem variação de calor (2, 3). Quando a radiação infravermelha de uma presa/predador atinge a membrana, as inervações ligadas ao cérebro fornecem informações térmicas como tamanho, distância e os movimentos do animal homeotérmico, fazendo com que a serpente se proteja ou ataque sua presa.[3,4] Especula-se também, que essa “imagem” se sobrepõe à imagem visual também criada no córtex da serpente (1). Até o presente, os estudos publicados do efeito de estímulos térmicos em serpentes são apenas baseados em observações comportamentais. Uma experiência preliminar efetuada pelos Profs. Reynaldo D. Pinto [IFSC-USP] e Denis O.V. Andrade [Dept.Zoologia-UNESP] comprovaram que informações térmicas podem ser medidas em vivo captando os sinais elétricos do nervo trigêmeo de cascavéis (*Crotalus durissus terrificus*). As presas artificiais serão construídas em nossos laboratórios dotados de geradores de radiação infravermelha composta por resistências que serão aquecidas na temperatura dos mamíferos (37-41°C) através de controladores de temperaturas. O movimento das falsas presas poderá ser controlado a partir de um equipamento externo. Com esses estímulos criados aliado ao conhecimento comportamental das serpentes à essas questões, espera-se obter medidas quantitativas para uma análise do sistema sensorial e neurológico que permitam elucidar a importância desse sistema nas serpentes.

Palavras-chave: Serpentes. Sistema sensorial infravermelho. Estimulos dinâmicos térmicos.

Referências

- 1 CAMPBELL, A. L., NAIK, R. R.; SOWARDS, L.; STONE, M. O. Biological infrared imaging and sensing. *Micron*, v. 33, n. 2, p. 211-225, 2002.
- 2 GRACHEVA, E. O. et al. Molecular basis of infrared detection by snakes. *Nature*, v. 464, n. 7261, p. 1006-1012, 2010.

3 GORIS, R. et al. Nervous control of blood flow microkinetics in the infrared organs of pit vipers. **Autonomic Neuroscience**, v. 84, n. 1-2, p. 98-106, 2000.

4 SICHERT, A. B.; FRIEDEL, P.; HEMMEN, J. L. A snake's perspective on heat: reconstruction of input using an imperfect detection system. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 6, p. 068105, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.068105.

PG-74A - Estudos espectroscópicos da proteína Peld de *Pseudomonas aeruginosa*, envolvida em vias de sinalização celular responsável pela formação de biofilmes

SILVA, Sumária Sousa¹; NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles¹
sumariasousa@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Uma série de processos bacterianos, incluindo formação de biofilmes, virulência e progressão celular são controladas por uma molécula mensageira baseada em nucleotídeos, c-di-GMP. De forma geral, altos níveis intracelulares dessa molécula promovem a expressão de proteínas relacionadas com o fenótipo de biofilmes, tais como, proteínas responsáveis pela produção de exopolissacarídeos presentes na matriz extracelular de biofilmes bacterianos (1). Em *Pseudomonas aeruginosa*, foi identificado um receptor específico para c-di-GMP, a proteína transmembranar Peld, cuja modulação por meio dessa molécula controla a produção de exopolissacarídeos influenciando diretamente na capacidade de formação de biofilmes (2). Nesse estudo apenas a região citoplasmática da proteína foi amplificada e clonada diretamente no vetor de expressão ppSUMO. Após a obtenção da proteína pura foram realizados estudos sobre estabilidade térmica e estado oligomérico, utilizando dicroísmo circular (CD) e espalhamento de luz dinâmico (DLS), respectivamente. O espectro de CD a 4 °C apresentou bandas intensa com valor de elipticidade negativa em 210 nm e 220 nm, as quais são associadas a estruturas em hélices- α . Com a redução gradual dessas estruturas, pode-se observar a temperatura crítica do processo de desnaturação térmica. Onde, duas transições, sendo a primeira em torno de 40°C e a segunda próxima de 75°C, provavelmente estão associadas a dois diferentes domínios presente na Peld. Por DLS a proteína apresentou raio hidrodinâmico de 8,1 nm e uma massa molecular de 72 kDa. Esses resultados são consistentes para a Peld na forma dimérica, confirmando os resultados do gel nativo. Estudos espectroscópicos da proteína Peld na forma apo e complexada com o dinucleotídeo auxiliará na compreensão de prováveis mecanismos de ativação por c-di-GMP. Ressalta-se que os resultados dessa pesquisa não só contribuirão para o entendimento dos mecanismos de regulação das vias de sinalização mediadas por c-di-GMP como, a longo prazo, poderão levar ao desenvolvimento de agentes terapêuticos contra infecções bacterianas.

Palavras-chave: Biofilmes. c-di-GMP. Peld.

Referências

- 1 HENGGE, R. Principles of c-di-GMP signaling in bacteria. **Nature Reviews Microbiology**, v. 7, n. 4, p. 263-273, 2009.
- 2 LEE, V. T.; MATEWISH, J. M.; KESSLER, J. L.; HYODO, M.; HAYAKAWA, Y.; LORRY, S. A cyclic-di-GMP receptor required for bacterial exopolysaccharide production. **Molecular Microbiology**, v. 65, n. 6, p. 1474–1484, 2007.

PG-75A - Caracterização da Enterococcal leucine-rich protein A (ElrA) de *Enterococcus faecalis*

MERLO, Thaís Panhan¹; CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha¹; NASCIMENTO, Alessandro Silva²; SERROR, Pascale³

thais.merlo@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas - Universidade Federal do ABC

³ Institut National de la Recherche Agronomique (INRA) - Institut National de la Recherche Agronomique (INRA)

Enterococcus faecalis é um dos principais patógenos nosocomiais relatados, sendo o causador de sepse e choque séptico em pacientes imunocomprometidos (1, 2). No Brasil, *E. faecalis* foi detectado como a principal causador de infecções humanas causadas por bactérias do gênero Enterococcus em pacientes hospitalizados (3). Vários fatores de virulência já foram relatados para *E. faecalis*, dentre eles um novo fator foi descrito por Brinster et al. (2007) (5): a Enterococcal leucine-rich protein A (ElrA). A ElrA é uma proteína de superfície com domínio WxL, que promove a interação da proteína com peptideoglicanos na parede celular da *E. faecalis* e foi observada em protoplastos (6). Este projeto tem por objetivo aprofundar o conhecimento sobre a ElrA. Primeiramente será verificada a presença do gene elrA em diferentes linhagens de *E. faecalis* isoladas no Brasil. Será então realizada a expressão e purificação da His-ElrA afim de obter a proteína para estudos estruturais e de interação com a membrana citoplasmática. Os estudos estruturais serão baseados em métodos experimentais de dicroísmo circular e espalhamento dinâmico de luz (DLS) e no método computacional de modelagem molecular para predizer a estrutura protéica. O estudo de interação será realizado utilizando-se filmes de Langmuir que mimetizam a membrana citoplasmática e permitem verificar se ocorre interação entre a ElrA e esta estrutura celular. Possuindo papel na virulência e na sepse, o estudo da ElrA é importante para gerar um maior entendimento das infecções causadas por *E. faecalis*. A estrutura protéica predita pode ser utilizada futuramente na identificação de ligantes e de pequenas moléculas que possam agir como inibidores da proteína ElrA, atenuando assim o processo infeccioso.

Palavras-chave: ElrA. Enterococcus faecalis. Virulência.

Referências

- 1 BAR, K.; WISPLINGHOFF, H.; WENZEL, R. P.; BEARMAN, G. M.; EDMOND, M. Systemic inflammatory response syndrome in adult patients with nosocomial bloodstream infections due to enterococci. **BMC Infectious Diseases**, Londres, v.6, n. 145, Sept. 2006.
- 2 LINDEN, P. Can enterococcal infections initiate sepsis syndrome? **Current Infectious Disease Report**, v. 5, n. 5, p. 372–378, 2003.

3 CONCEIÇÃO, N.; OLIVEIRA, C. C. H. B.; SILVA, P. R.; ÁVILA, B. G. M.; OLIVEIRA, A. G. Trends in antimicrobial resistance among clinical isolates of enterococci in a Brazilian tertiary hospital: a 4-year study. **Revista da Sociedade Brasileira de Medicina Tropical**, Uberaba, v. 44, n. 2, p. 177-181, 2011.

4 KAYAOGLU, G.; ØRSTAVIK, D. Virulence factors of Enterococcus faecalis: relationship to endocytic disease. **Critical Review in Oral Biology and Medicine**, v. 15, n. 5, p 308-320, 2004.

5 BRINSTER, S.; POSTERARO, B.; BIERNE, H.; ALBERTI, A.; MAKHZAMI, S.; SANGUINETTI, M.; SERROR, P. Enterococcal leucine-rich repeat-containing protein involved in virulence and host inflammatory response. **Infection and Immunity**, Washington DC, v. 75, p. 4463- 4471, 2007.

6 BRINSTER, S.; FURLAN, S.; SERROR, P. C-terminal WxL domain mediates cell wall binding in Enterococcus faecalis and other gram-positive bacteria. **Journal of Bacteriology**, Washington DC, v. 189, n. 4, p.1244–1253, 2007. DOI:10.1128/JB.00773-06.

PG-76A - Desenvolvimento de genossensor contendo oligonucleotídeos funcionalizados e AuNPs para aplicação no diagnóstico precoce da hipertensão arterial

ROLIM, Thalita¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

thalita@ursa.ifsc.usp.br

¹ Laboratório de Nanomedicina e Nanotoxicidade - Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A crescente prevalência de hipertensão arterial na população mundial e os riscos por ela apresentados nas doenças coronarianas têm aumentado muito o interesse em pesquisas relacionadas ao diagnóstico precoce dessa doença. Além disso, devido ao fato de sua origem ser, freqüentemente, multifatorial, o tratamento da hipertensão arterial é dificultado (3). Fatores ambientais associados à predisposição genética levam o indivíduo a apresentar índices pressóricos elevados de pressão arterial quando comparados a indivíduos que não apresentam tal predisposição (3). Identificar a predisposição genética, por meio de genossensores, seria ideal para brandear ou, até mesmo, evitar o desenvolvimento da patologia. Os genossensores são dispositivos analíticos de última geração que apresentam alta especificidade, sensibilidade e podem ser aplicados para a detecção precoce de muitas doenças genéticas (1,2). O objetivo deste estudo é a síntese e complexação de nanopartículas de ouro funcionalizadas, com grupos aminas, com oligonucleotídeo modificado, específico para o polimorfismo localizado no Intron 16 do gene da ECA, enzima conversora da angiotensina I, que está no locus 17q23. Os dispositivos utilizam nanocomplexos de oligonucleotídeos e nanopartículas de ouro, que reconhecem sequências específicas do DNA. As detecções da sequência alvo são realizadas por medidas elétricas e análise eletroquímica, além de estudos de fluorescência. Análises por espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) demonstraram que as interações entre as nanopartículas e pequenas sequências de DNA – Oligonucleotídeos, ocorrem por meio do grupo de fosforotioato do oligonucleotídeo modificado e as aminas primárias presentes na superfície da AuNPs.

Palavras-chave: Genossensor. Hipertensão arterial. Nanomedicina.

Referências:

- 1 SASSOLAS, A.; LECA-BOUVIER, B. D.; BLUM, L. J. DNA biosensors and microarrays. **Chemical Reviews**, v. 108, n. 1, p. 109-139, 2008.
- 2 KERMA, K.; KOBAYASHI, M.; TAMIYA, E. Recent trends in electrochemical DNA biosensor technology. **Measurement Science and Technology**, v. 15, p. R1-R11, 2004. DOI: 10.1088/0957-0233/15/2/R01.
- 3 SOCIEDADE BRASILEIRA DE CARDIOLOGIA. Departamento de Hipertensão Arterial - DHA. **V diretrizes brasileiras de hipertensão arterial**. Disponível em: <<http://departamentos.cardiol.br/dha/vdiretriz/vdiretriz.asp>>. Acesso em: 08/2011.

PG-76B - Development of genosensors containing functionalized oligonucleotides and AuNPs for early diagnosis of blood hypertension.

ROLIM, Thalita¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

thalita@ursa.ifsc.usp.br

¹ Laboratório de Nanomedicina e Nanotoxicidade - Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

The growing prevalence of blood hypertension on population worldwide and the risks exhibited by heart diseases have foster researches in areas related to early diagnosis and detection of coronary diseases. In addition, since the origin of such diseases is multifactorial, the treatment of blood hypertension is difficult (3). Environmental aspects associated to genetic predisposition may lead the individual to produce high indices of blood pressure (3). The identification of the genetic predisposition, using genosensors, would be of importance to prevent the development of the pathology. Genosensors are advanced analytical devices that exhibit high specificity, sensitivity and may be applied for the early detection of many genetic diseases (1, 2). The purpose of this study was the synthesis and complexation of gold nanoparticles functionalized with amino groups and modified oligonucleotides specific from the polymorphism located in the Intron 16 of the ACE gene. The devices use nanocomplexes of oligonucleotides and gold nanoparticles that recognize specific sequences from locus 17q23DNA. The detections of the target sequence are carried out by electrical, electrochemical and fluorescence analyses. Investigations using Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) demonstrated that the interactions between the nanoparticles and small sequences of DNA –Oligonucleotides occur via the phosphorothioate group of the modified oligonucleotide and the primary amines present in the surface of AuNPs.

Keywords: Genosensor. Blood hypertension. Nanomedicine.

References:

- 1 SASSOLAS, A.; LECA-BOUVIER, B. D.; BLUM, L. J. DNA biosensors and microarrays. **Chemical Reviews**, v. 108, n. 1, p. 109-139, 2008.
- 2 KERMA, K.; KOBAYASHI, M.; TAMIYA, E. Recent trends in electrochemical DNA biosensor technology. **Measurement Science and Technology**, v. 15, p. R1-R11, 2004. DOI: 10.1088/0957-0233/15/2/R01.
- 3 SOCIEDADE BRASILEIRA DE CARDIOLOGIA. Departamento de Hipertensão Arterial - DHA. **V diretrizes brasileiras de hipertensão arterial**. Disponível em: <<http://departamentos.cardiol.br/dha/vdiretriz/vdiretriz.asp>>. Acesso em: 08/2011.

PG-77A - Nanobiocompósitos contendo nanopartículas e proteínas para aplicações biomédicas

MARANGONI, Valéria S.¹; PAINO, Ieda¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

valeria@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nanobiocompósitos possuem elevado potencial para aplicações biomédicas devido à sua habilidade de combinar propriedades de reconhecimento dos biomateriais com as propriedades eletrônicas, óticas e catalíticas únicas exibidas pelos materiais quando estruturados na escala nanométrica (1). Neste estudo, descrevemos uma nova estratégia para a conjugação de nanopartículas de ouro (AuNPs) com a lectina Jacalina, que tem atraído muito atenção devido sua habilidade de se ligar preferencialmente a algumas células tumorais (2). As AuNPs formadas na presença do dendrimero poliamidoamina (PAMAM) foram conjugadas com a Jacalina por complexação. O complexo resultante foi separado por centrifugação. Espectroscopia de fluorescência mostrou um deslocamento para maiores comprimentos de onda no espectro de emissão da Jacalina após a conjugação com AuNPs, o que é um indicativo da interação entre a proteína e as AuNPs. Análises por dicroísmo circular revelaram que a proteína manteve sua estrutura secundária após a conjugação com as nanopartículas. A presença das AuNPs também não afetou a atividade da proteína, como evidenciado nos ensaios de hemaglutinação. O complexo formado foi ainda conjugado com um marcador fluorescente e testado em cultura de células, revelando que o nanocompósito possui maior afinidade por um tipo de célula cancerígena (HeLa) se comparado com fibroblastos saudáveis (IMR-90). Estes resultados são relevantes uma vez que o complexo AuNPs/Jacalin pode ser utilizado para aplicações biomédicas incluindo tratamento e diagnóstico de câncer.

Palavras-chave: Nanobiotecnologia. Nanopartículas de ouro. Proteínas.

Referências

- 1 NEL, A. E.; MÄDLER, L.; VELEGOL, D.; XIA, T.; HOEK, E. M. V.; SOMASUNDARAN, P.; KLAESSIG, F.; CASTRANOVA, V.; THOMPSON, M. Understanding biophysicochemical interactions at the nano–bio interface. **Nature Materials**, v. 8, p. 543-557, 2009. DOI:10.1038/nmat2442.

PG-77B - Nanobiocomposites containing nanoparticles and proteins for medical applications

MARANGONI, Valéria S.¹; PAINO, Ieda¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

valeria@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nanobiocomposites have been considered candidate materials for biomedical applications due to their ability of combining the recognition properties of biomaterials with the unique electronic, photonic, and catalytic features of nanoparticles (1). In this study we describe a new strategy for conjugating gold nanoparticles (AuNPs) and Jacalin, a lectin that has attracted a great attention due to its specific recognition of some tumor cells (2). The AuNPs formed in the presence of the polyamidoamine (PAMAM) dendrimer G4 were conjugated with the Jacalin via complexation. The protein/nanoparticle complexes were separated by centrifugation. Fluorescence spectroscopy showed a red-shift in the emission spectrum after conjugation of Jacalin to AuNPs, which was indicative of interaction occurring between AuNPs and the protein. Circular dichroism (CD) analyses revealed that protein maintained its secondary structure upon conjugation with the nanoparticles. The presence of AuNPs did not affect the activity of Jacalin, as revealed by its ability to hemagglutination. The AuNPs/Jacalin nanocomplex was further conjugated to a fluorescent marker and tested in cell cultures, revealing that the complex presented high affinity for a cancer cell (HeLa) compared with the healthy fibroblasts (IMR-90). The latter results are very relevant, since the AuNp/Jacalin nanocomplex may be used for biomedical applications including treatment and diagnostics of cancer.

Keywords: Nanobiotechnology. Gold nanoparticles. Proteins.

References

- 1 NEL, A. E.; MÄDLER, L.; VELEGOL, D.; XIA, T.; HOEK, E. M. V.; SOMASUNDARAN, P.; KLAESSIG, F.; CASTRANOVA, V.; THOMPSON, M. Understanding biophysicochemical interactions at the nano–bio interface. **Nature Materials**, v. 8, p. 543-557, 2009. DOI:10.1038/nmat2442.

PG-78A - Determinação estrutural do complexo Selenocisteína Sintase t-RNA de *E.coli*

SERRÃO, V. H. B.¹; MANZINE, L. R.¹; SILVA, I. R.¹; PORTUGAL, R. V.²; THIEMANN, O. H.¹

vitor.serrao@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Laboratório Nacional de Nanotecnologia - Laboratório Nacional de Luz Sincrotron

A biossíntese do 21º amino ácido, Selenocisteína (Sec - U), exige complexa maquinaria enzimática em eubactérias: Selenocisteína Sintase (SELA), Fator de Alongamento Selenocisteína Específica (Selb), Sintetase Selenophosphate (SELD) e um tRNA específico (tRNAsec). O resíduo é incorporado a uma selenocisteína em uma proteína nascente em um códon de sinalização de parada, UGA, como um site de incorporação Sec pela presença de uma seqüência de inserção de selenocisteína (SECIS), a incorporação do códon UGA na região de codificação em bactérias e em uma UTR 3' em archaea e nos eucariotas. SELA desempenha um papel central neste caminho, modificando o resíduo Serina presente no tRNAsec por seril-tRNA Sintetase (SerRS) e convertê-lo em Selenocisteína. Esta enzima forma um complexo homodímerico que especificamente reconhece e se liga a seril-tRNAsec (1). Nossa objetivo é a investigação estrutural por Microscopia de Força Atômica (AFM), Crio Microscopia Eletrônica (Cryo-EM) e Cristalografia dos complexos SELA e SELA-tRNAsec. Dados de microscopia ajudam a determinar parâmetros dimensionais como dimensão máxima, massa molecular e raio de giro. Recentemente, estudos viram perspectivas de assumir um tRNA para a proteína monomérica de SELA, cristais de SELA-tRNA complexos e nativos SELA foram obtidos e os modelos da AFM e Cryo-EM podem ajudar a decidir o número de tRNA interagentes no complexo SELA-tRNAsec.

Palavras-chave: Selenocisteína sintase. Selenocisteína. Selenocisteína - tRNAs.

Referências

- 1 ENGELHARDT, H. et al. Structure of selenocysteine synthase from *E.coli* and location of tRNA in the seryl-tRNAsec-enzyme complex. **Molecular Microbiology**, v. 6, n. 23, p. 3461-67, 1992.

PG-78B - Structural determination of selenocysteine synthase t-RNA complex from *E. coli*

SERRÃO, V. H. B.¹; MANZINE, L. R.¹; SILVA, I. R.¹; PORTUGAL, R. V.²; THIEMANN, O. H.¹

vitor.serrao@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Laboratório Nacional de Nanotecnologia - Laboratório Nacional de Luz Sincrotron

The biosynthesis of the 21th amino acid, Selenocysteine (Sec – U), requires complex enzymatic machinery composed in eubacteria of: Selenocysteine Synthase (SELA), Selenocysteine Specific Elongation Factor (SELB), Selenophosphate Synthetase (SELD) and a specific Selenocysteine Inserting tRNA (tRNAsec). The Selenocysteine residue is incorporated into a nascent protein at a UGA like stop codon signaling as a Sec incorporation site by the presence of a Selenocysteine Insertion Sequence (SECIS), embedding the UGA codon in the coding region in bacteria and in a 3' UTR in archaea and eukarya. SELA plays a central role in this pathway by modifying the Serine residue charged into the tRNAsec by Seryl-tRNA Synthetase (SerRS) and converting it into Selenocysteine. This enzyme forms a homodecameric complex that specifically recognizes and binds to Seryl-tRNAsec (1). The specific interaction of SELA and its tRNA remains unclear. Our aim is the structural investigation by Microscopy of Atomic Power, Cryo-Eletronic Microscopy and Cristallography of Escherichia coli SELA and SELA-tRNAsec. Microscopy datas determined dimensional parameters as maximum dimension, molecular mass and radius of gyration. Recently study saw prospects of assuming one tRNA for monomeric protein of SELA, projections Crystals of SELA-tRNA complex and SELA native is in growth prospects, and the modells of MFA and Cryo-Microscopy may help to decide the number of tRNA interections of SELA.

Keywords: Selenocysteine synthase. Selenocysteine. Selenocysteine - tRNAs.

Referências

- 1 ENGELHARDT, H. et al. Structure of selenocysteine synthase from *E.coli* and location of tRNA in the seryl-tRNAsec-enzyme complex. **Molecular Microbiology**, v. 6, n. 23, p. 3461-67, 1992.

PG-79A - Desenvolvimento de um genossensor de baixo custo e resposta rápida

CORRER, W. R.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

wcorrer@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O mapeamento de mutações em genes e a detecção rápida de parasitas são altamente desejáveis para diagnosticar doenças de maneira eficiente. Para a detecção de sequências de DNA, a técnica mais utilizada ainda é PCR (Polymerase Chain Reaction). Recentemente, genossensores estão surgindo como uma técnica alternativa ao PCR na detecção de sequências específicas. Genossensores são mais rápidos, necessitam de menor quantidade de amostras, possuem baixo limite de detecção e necessitam menos manipulação da amostra. Nossa objetivo nesse trabalho é desenvolver um genossensor de baixo custo e de resposta rápida para detecção do Human Papiloma Virus (HPV), utilizando-se medidas elétricas para detecção. Alguns tipos de HPV são fortemente correlacionados com o câncer do colo de útero. Entre estes tipos, HPV tipo 16 e HPV tipo 18 são responsáveis pela maioria dos casos de câncer de colo de útero. Moléculas de DNA contendo sequência complementar do alvo, chamadas de DNA-probe, são imobilizadas sobre a superfície de um eletrodo interdigitado. Esse eletrodo é colocado em contato com a amostra, induzindo hibridização. Após a hibridização, sequências de DNA ligadas a nanopartículas de ouro (DNA-reporter) são colocadas em contato, promovendo uma alteração da resposta elétrica do eletrodo.

Palavras-chave: HPV. Genosensor. Biosensor.

Referências

1 MUÑOZ, N. et al. Epidemiologic classification of human Papillomavirus types associated with cervical cancer. **New England Journal of Medicine**, v. 348, n. 6, p. 518-27, 2003.

2 BEAUCAGE, S. L. Strategies in the preparation of DNA oligonucleotide arrays for diagnostic applications. **Current Medicinal Chemistry**, v. 8, n. 10, p. 1213-44, 2001.

PG-79B - Development of a low-cost and fast-response genosensor

CORRER, W. R.¹; ZUCOLOTTO, V.¹

wcorrer@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

The mapping of gene mutation and fast detection of parasites are highly desirable to properly diagnose diseases. Currently, the most common strategy employed to detect DNA sequences is related to the use of PCR (Polymerase Chain Reaction). However, research on genosensors has increased as a technique alternative to PCR in the detection of specific DNA sequences. Genosensors are faster, exhibit lower limits of detection and requires simpler samples preparation. Our goal in this project is to develop a genosensor for Human Papiloma Virus (HPV). The interest in detecting HPV comes from the fact that virus is related to the development of certain types of cervical cancer, being the types HPV 16 and HPV 18 the most common in this cases. Detection is based on the immobilization of a probe sequence, complementar to the target sequence, on interdigitated electrodes. After being in contact with the target sequence, hybridization occurs between the probe sequence and part of the target. Following, a reporter sequence bearing a metallic nanoparticle is allowed to hybridize with the target sequence, which induces variation in the electrical response of the electrodes subjected to an applied voltage.

Keywords: HPV. Genosensor. Biosensor.

Referências

- 1 MUÑOZ, N. et al. Epidemiologic classification of human Papillomavirus types associated with cervical cancer. **New England Journal of Medicine**, v. 348, n. 6, p. 518-27, 2003.
- 2 BEAUCAGE, S. L. Strategies in the preparation of DNA oligonucleotide arrays for diagnostic applications. **Current Medicinal Chemistry**, v. 8, n. 10, p. 1213-44, 2001.

PG-80A - Análise e caracterização de nanoestruturas de polímeros mediante imagens AFM

GUILLEN, Carolina¹; PEREIRA-DA-SILVA, Marcelo¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

guillen.carolina@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Os blocos de copolímeros por sua formação de padrões na escala nanométrica são necessários em muitas aplicações como na indústria de microeletrônicos, técnicas de revestimentos, técnicas de filtros, adesivos, lubrificação, biossensores, modelos submicrométricos, etc. Sendo assim a automontagem um princípio importante na fabricação de estruturas organizadas e de dispositivos na mesoescala, este processo de automontagem é uma boa alternativa para o controle da formação de padrões na superfície e a nano fabricação (1). Em alguns experimentos particulares dos filmes finos de blocos de copolímeros sobre o substrato de mica mediante as técnicas de spin-coating, dip-coating ou auto ensamblado formam-se estruturas finais de padrões de tiras e gotículas. Este é o caso do experimento a descrever, obtido por um processo de livre de evaporação e desmolhamento do solvente, reportado já em (2, 3), e observando se também a formação de tiras e gotículas. Neste relatório se analisar e quantizar as estruturas das gotículas, junto com os câmbios da fase das imagens, reportados também em (4-6) usando a técnica de TM-AFM, fazendo-se experimentos com amostras SEBS sendo assim a principal motivação descrever e quantizar as estruturas geradas por estes, a ferramenta desenvolvida faz um análise quantitativa de regiões de interesse numa imagem, observando-se com frequência certos fenômenos nos quais se deseja fazer as medições para a descrição destas observações. Esses dados podem ser utilizados posteriormente para a interpretação e análise de resultados, para logo ter as generalizações e conclusões.

Palavras-chave: Polímeros SEBS. Processamento imagens. AFM.

Referências

- 1 HAN, X.; HU, J.; LIU, H.; HU, Y. SEBS aggregate patterning at a surface studied by atomic force microscopy. **Langmuir: the acs journal of surfaces and colloids**, v. 22, n. 7, p. 3428-3433, 2006.
- 2 BAR, G.; THOMANN, Y.; WHANGBO, M. H. Characterization of the morphologies and nanostructures of blends of poly (styrene)-block-poly (ethene-co-but-1-ene)-block-poly (styrene) with isotactic and atactic polypropylenes by tapping-mode atom. **Langmuir: the acs journal of surfaces and colloids**, v. 14, n. 5, p. 1219-1226, 1998.
- 3 HAN, X.; XU, J.; LIU, H.; HU, Y. A new approach to thick films of a block copolymer with ordered surface structures. **Macromolecular Rapid Communications**, v. 26, n. 22, p. 1810-1813, Nov. 2005. DOI: 10.1002/marc.200500440.
- 4 THOMANN, Y.; CANTOW, H. J.; BAR, G.; WHANGBO, M. H. Investigation of

morphologies and nanostructures of polymer blends by tapping mode phase imaging. **Applied Physics A: materials science & processing**, v.66, p. S1233-S1236, March 1998. DOI: 10.1007/s003390051333.

5 KARTHAUS, O.; GRASJO, L.; MARUYAMA, N.; SHIMOMURA, M. Formation of ordered mesoscopic polymer arrays by dewetting. **Chaos**, Woodbury, N.Y., v. 9, n. 2, p. 308-314, June 1999.

6 CARVALHO, A. J. F.; PEREIRA-DA-SILVA, M.; FARIA, R. M. Self-organization of triblock copolymer patterns obtained by drying and dewetting. **European Physical Journal E: soft matter**, v. 20, n. 3, p. 309-15, July 2006.

PG-81A - Estudo da influência topológica na dinâmica integra-e-dispara em redes neurais artificiais

COMIN, Cesar Henrique¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

chcomin@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A tarefa de entender os fundamentos do processamento de informações pelo cérebro tem ganhado cada vez mais atenção no meio científico. Teoricamente o problema costuma ser abordado em duas frentes: 1 - descrição fenomenológica dos neurônios, de forma a criar modelos matemáticos (com ou sem intuição biológica) que reproduzem características eletrofisiológicas observadas experimentalmente *in vivo* ou *in vitro*, como adaptação, bursting, atraso na transmissão sináptica, refratoriedade e outros (1), 2 - descrição do ponto de vista informativo (2), ou seja, do código neuronal utilizado para o recebimento e transmissão da informação entre neurônios. Tradicionalmente a descrição fenomenológica é aplicada em uma única célula neuronal, de forma a, dado um estímulo, reproduzir a resposta medida em um experimento prévio. Nossa propósito é estudar o papel exercido pela topologia de sinapses ao levarmos em conta um grande número de elementos excitáveis (também denominados acoplados por disparos) quando descritos pelo modelo integra e dispara, que apesar de simples proporciona uma boa descrição fenomenológica e riqueza de informação quando estudado em rede. Consideramos diversas topologias clássicas como aleatória, geográfica e pequeno mundo e analisamos tanto o comportamento coletivo do sistema, dado pela ativação geral da rede e pela distribuição de taxas, como a relação local entre estrutura e dinâmica através de um método desenvolvido por nós. Além de confirmarmos a existência de estados síncronos e assíncronos auto sustentáveis já relatados em (3), observamos com o nosso método que elementos de mesma topologia local podem possuir características dinâmicas bem distintas. A metodologia abre caminho para o entendimento de dinâmicas neurais mais complexas como FitzHugh-Nagumo e Hindmarsh-Rose, ou ainda para outras dinâmicas clássicas na área de sistemas complexos, como propagação de epidemia e osciladores de Kuramoto.

Palavras-chave: Redes complexas. Integra e dispara. Modelo neuronal.

Referências

- 1 GERSTNER, W.; KISTLER, W. **Spiking neuron models**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. 480 p.
- 2 RIEKE, F.; WARLAND, D.; STEVENINCK, R. R. R.; BIALEK, W. **Spikes: exploring the neural code**. Cambridge: MIT Press, 1999. 395 p.
- 3 ROXIN, A.; RIECKE, H.; SOLLA, S. A. Self-sustained activity in a small-world network of excitable neurons. **Physical Review Letters**, v. 92, n. 19, p. 198101, May 2004. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.198101.

PG-82A - Espectroscopia por ressonância magnética resolvida no tempo através do método FDM

SILVA, Cíntia Maira Pereira da¹; MAGON, Claudio José¹; TANNÚS, Alberto¹
ceci_aluad@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A espectroscopia de Ressonância Magnética (MRS, Magnetic Resonance Spectroscopy) in vivo possui uma alta sensibilidade em determinar uma ampla gama de metabólitos dos tecidos, as taxas de reação química, bioenergética e suas variações causadas por estímulo ou perturbação patológica em regiões espacialmente selecionadas de um órgão vivo, por exemplo, em um cérebro (1). Entretanto uma das maiores limitações da MRS de próton in vivo é a medida e a identificação da contribuição individual de metabólitos em um espectro adquirido com TE curto (2). Isto dificulta fazer experimentos in vivo para a análise da variação dinâmica de metabólitos em pesquisas de caráter funcional, uma vez que estas variações ocorrem numa duração inferior àquela permitida pelos métodos utilizados nos espetrômetros atuais. Uma das maiores desvantagens da análise espectral pela metodologia atualmente empregada, a Transformada de Fourier, está relacionada aos artefatos gerados quando se deseja truncar o sinal temporal (3). Estudos recentes (4, 5) vêm sendo conduzidos empregando algoritmos de processamento de dados baseados no Método da Diagonalização Filtrada (FDM, Filtered Diagonalization Method) com ótimos resultados em espectros de 1D e 2D. O FDM compartilha algumas das características das várias abordagens algébricas lineares, mas é numericamente mais eficiente para a análise de sinais truncados quando comparado à Transformada Rápida de Fourier (FFT) (5). Neste estudo pretendemos validar o método FDM inicialmente para MRS de 1H resolvida no tempo, através de experimentos e simulações de variações dinâmicas da concentração de metabólitos humanos cerebrais, cuja resolução temporal geralmente não é bem resolvida por FFT.

Palavras-chave: FDM. Espectroscopia de RM. Espectroscopia funcional.

Referências

- 1 CHEN, W.; ZHU, X. H. Dynamic study of cerebral bioenergetics and brain function using in vivo multinuclear MRS approaches. **Concepts in Magnetic Resonance Part A**, v. 27A, n. 2, p. 84-121, Nov. 2005.
- 2 GOVINDARAJU, V.; YOUNG, K.; MAUDSLEY, A. A. Proton NMR chemical shifts and coupling constants for brain metabolites. **NMR in Biomedicine**, v. 13, n. 3, p. 129-153, May 2000.
- 3 MANDELSHTAM, V. A. FDM: the filter diagonalization method for data processing in NMR experiments. **Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy**, v. 38, n. 2, p. 159-196, Mar. 2001.

4 MORAES, T. B. **O método da diagonalização filtrada (FDM) e suas aplicações para a ressonância magnética.** 2011. 87 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo. São Carlos, 2011.

5 MANDELSHTAM, V. A.; TAYLOR, H. S.; SHAKA, A. J. Application of the filter diagonalization method to one- and two-dimensional NMR spectra. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 133, n. 2, p. 304-312, Aug. 1998.

PG-83A - Interface gestual baseada em visão computacional

PRADO NETO, Elias Ximenes do¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

tesselator@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Um novo estágio para interação usuário computador está sendo alcançado através de técnicas e ferramentas de análise de vídeo. Nos últimos anos, interfaces para jogos eletrônicos, obtidos através de câmeras dos mais variados tipos, estão sendo lançadas para diferentes consoles e plataformas computacionais (1). Além de jogos eletrônicos, outras aplicações, como a entrada de dados em dispositivos móveis (2) e a modelagem virtual de objetos tridimensionais (3), devem se beneficiar deste modo de interface em um futuro próximo. Escolhemos estudar e desenvolver uma interface gestual baseada na detecção dos gestos das mãos por câmeras tridimensionais; as razões foram sua grande popularidade, baixa invasibilidade, intuitividade na realização de tarefas, eficiência para detecção de movimentos, capacidade de extrair a posição das mãos e outras partes do corpo em relação à câmera. O rastreamento de mãos por visão computacional em tempo real pode ser utilizado para substituir o mouse em todas as suas funções, (4) para usuários leigos isto é bastante atrativo, já que o manuseio de um mouse exige coordenação motora fina, algum tempo para adaptação e capacidade de abstração entre os seus movimentos e o do ponteiro indicador. O reconhecimento de gestos com informação de profundidade e a utilização das duas mãos simultaneamente, será de grande utilidade para usuários avançados, permitindo-lhes alternar entre ferramentas, com apenas uma de suas mãos, sem interromper o trabalho realizado por sua outra mão; manusear objetos virtuais e selecionar opções complexas através de gestos configuráveis; Estaremos criando um framework e a partir de três categorias de softwares distintos: Modelagem 3D, Jogos e Interfaces Gráficas de Usuário. Estas categorias de softwares foram escolhidas visando analisar o desempenho da interface, avaliar a capacidade de adaptação de diferentes tipos de usuário e desenvolver as melhores técnicas para a utilização das informações obtidas por visão computacional para a execução de tarefas capazes de refletir as potencialidades deste método.

Palavras-chave: Visão computacional. Interface usuário computador. STOCKHOLM. LNCS 2006.

Referências

- 1 PREKOPCSÁK, Z.; HALÁCSY, P.; GÁSPÁR-PAPANEK, C. Design and development of an everyday hand gesture interface. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON HUMAN COMPUTER INTERACTION WITH MOBILE DEVICES AND SERVICES, 10, 2008, New York, USA. **Proceedings...** New York: ACM, 2008.
- 2 HANNUKSELA, Z.; BARNARD, M.; SANGI, P.; HEIKKIL, J. Adaptive motion-based gesture recognition interface for mobile phones. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTER VISION SYSTEMS, (ICVS'08), 6, Heidelberg. **Proceedings...** Berlin: Springer-Verlag, 2008.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 LINGRAND, D. et al. Gestaction3D: a platform for studying displacements and deformations of 3D objects using hands. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTER-AIDED DESIGN OF USER INTERFACES, (CADUI 2006), 6, 2006, Bucharest, Romania. **Proceedings...** Bucharest, 2008.

4 LAPTEV, I.; LINDEBERG, T. Tracking of multi-state hand models using particle filtering and a hierarchy of multi-scale image features. **International Journal of Computer Vision**, v 52, n. 2/3, p. 97-120, 2003.

PG-84A - Variações termodinâmicas em superfluidos atômicos contendo vórtices

BAGNATO, Guilherme de Guzzi¹; TELLES, Gustavo Deczka¹

gui.bagnato@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Um dos excitantes tópicos relacionados com fluidos quânticos atômicos é a possibilidade de estudar com detalhes efeitos quânticos macroscópicos. Dentre estes efeitos, está a existência de rotação. No regime de superfluídez, as rotações são quantizadas, formando os chamados vórtices quânticos. A presença destes vórtices evolui para diversas situações de grande interesse. Muitos vórtices juntos podem evoluir para um estado de turbulência quântica, ou formar uma rede de vórtices ou mesmo mostrar efeitos relacionados com a dinâmica de comportamento dos vórtices, formando cluster de diversos tipos. Uma questão natural quando temos um superfluido contendo vórtices, corresponde a variações termodinâmicas que ocorrem no sistema, quando estes estados de vórtices são formados. Paralelamente aos fluidos clássicos, os quânticos mostram alterações de pressão ΔP quando os vórtices são gerados. Neste trabalho, pretendemos utilizar uma nova forma de gerar vórtices em uma amostra de fluido quântico aprisionado, através da introdução de um perfil de fase por introdução de campo magnético na amostra. Uma vez produzido o vórtice, de circulação fundamental ou não, deveremos medir as variações do parâmetro de pressão (P) causada pela presença de vórtices. Como temos um gás heterogêneo, mantido num potencial Harmônico, o parâmetro de pressão é uma grandeza de natureza macroscópica, que deve representar as variações termodinâmicas que se sucedem após a germinação de singularidades como vórtices fundamentais ou multi-carregados. O trabalho tem grande relevância no sentido de entendermos rotas de evolução de vórtices para o estado de turbulência quântica, recentemente medido pelo nosso laboratório.

Palavras-chave: Superfluido. Vórtices. Termodinâmica.

Referências

- 1 ROCHIN, V. R. et al. BEC phase diagram of a ^{87}Rb trapped gas in terms of macroscopic thermodynamic parameters. **Disponível em:** <http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1102/1102.4642v1.pdf>. Acesso em: Set. 2011.
- 2 DONNELLY, R. J. **Quantized vortices in helium II.** Cambridge: Cambridge University Press, 1991. 368 p.
- 3 NASCIMBÈNE, S.; NAVON, N.; JIANG, K. J.; CHEVY, F.; SALOMON, C. Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas. **Nature**, London, v. 463, p. 1057-1060, Feb. 2010. DOI: 10.1038/nature08814.

PG-85A – Estrutura atômica de nanopartículas utilizando o algoritmo Basin-Hopping Monte Carlo

RONDINA, Gustavo G.¹; SILVA, Juarez L. F. da¹

rondina@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Resultados experimentais mostram que nanopartículas (NPs) apresentam grande potencial para o desenvolvimento de nanocatalisadores, abrindo assim muitas possibilidades para uma vasta gama de aplicações tecnológicas. Em contraste com materiais em bulk, cuja estrutura atômica é conhecida há décadas, a identificação da estrutura atômica de NPs ainda é um desafio, uma vez que técnicas experimentais, como difração de raios-X, possuem dificuldades em acessar diretamente as propriedades estruturais. Existe portanto um interesse em obter uma compreensão a nível atômico da estrutura dessas NPs como função dos seus tamanhos e formas, que é, por sua vez, um requisito básico para obter um melhor entendimento de suas propriedades de estabilidade e reatividade. O uso de ferramentas computacionais empregando o estado da arte em algoritmos de busca global é considerado como uma das melhores abordagens para atingir esse objetivo. Neste poster nós apresentamos uma implementação do algoritmo Basin-Hopping Monte Carlo (BHMC), que inclui os desenvolvimentos mais recentes em técnicas de otimização utilizando BHMC e também apresentamos nossas sugestões para melhoria da otimização de NPs inicializadas aleatoriamente. Para testar nossa implementação nós selecionamos o já conhecido e amplamente estudado problema de otimização de NPs de Lennard-Jones (LJ). Apresentamos os resultados para partículas de tamanho 2 até 500 átomos, sendo que a energia reduzida total estão em excelente acordo com os melhores resultados já reportados na literatura para o problema de otimização de NPs de LJ (1, 2). Além disso, nós também discutimos estratégias para combinar nossa implementação com métodos de primeiros princípios, como a teoria do funcional da densidade conforme implementada no código FHI-aims, que será aplicado para o estudo de NPs de metais de transição.

Palavras-chave: Otimização global. Nanopartículas. Modelagem estrutural.

Referências

1 WALES, D. J.; DOYE, J. P. K.; DULLWEBER, A.; HODGES, M. P.; NAUMKIN, F. Y.; CALVO, F.; HERNNDEZ-ROJAS, J.; MIDDLETON, T. F. **The Cambridge Cluster Database** Disponível em: <<http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>>. Acesso em 21 Aug 2011.

2 SHAO, X. G. **A list of the global minimal energies and coordinates of the LJ Clusters.** Disponível em: <http://chinfo.nankai.edu.cn/chmm/pubmats/LJ/ljstructures_e.html>. Acesso em: 21 Aug 2011.

PG-85B - Atomic structure of nanoparticles using the Basin-Hopping Monte Carlo algorithm

RONDINA, Gustavo G.¹; SILVA, Juarez L. F. da¹

rondina@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Experimental results have shown that nanoparticles (NPs) have great potential for the designing of nanocatalysts, which can open the possibility for a wide range of technological applications. In contrast with bulk materials, for which the atomic structure have been known for decades, the identification of the atomic structure of NPs is still a challenge as traditional experimental techniques such as X-ray diffraction presents difficulties to access those properties directly. Thus, there is a great interest in obtaining an atomistic understanding of the NPs structure as a function of size and shape, which is a basic requirement to obtain a better understanding of their stability and reactivity properties. Computational tools using state-of-the-art in global search algorithms have been considered as one the best approaches to obtain a deeper understanding of the atomic structure of NPs. In this poster we report our Basin-Hopping Monte Carlo (BHMC) implementation, which includes the most recent developments in BHMC techniques, and our suggestions to improve the optimization of randomly initialized unbiased NPs. To test our implementation and developments we selected the well known Lennard-Jones (LJ) pair-potential to describe the interaction between the atoms in the NPs. We will report results for particles from 2 up to 500 atoms. The reduced total energies are in excellent agreement with the benchmark results (1, 2), which are considered as the best reference results for the LJ optimization problem. Furthermore, we also discuss our strategies to combine our implementation with first-principles methods such as density functional theory as implemented in the FHI-aims code, to be applied in the study of transition-metal NPs.

Keywords: Global optimization. Nanoparticles. Structural modeling.

Referências

- 1 WALES, D. J.; DOYE, J. P. K.; DULLWEBER, A.; HODGES, M. P.; NAUMKIN, F. Y.; CALVO, F.; HERNANDEZ-ROJAS, J.; MIDDLETON, T. F. **The Cambridge Cluster Database** Disponível em: <<http://www-wales.ch.cam.ac.uk/CCD.html>>. Acesso em 21 Aug 2011.
- 2 SHAO, X. G. **A list of the global minimal energies and coordinates of the LJ Clusters.** Disponível em: <http://chinfo.nankai.edu.cn/chmm/pubmats/LJ/ljstructures_e.html>. Acesso em: 21 Aug 2011.

PG-86A - Análise de algoritmos distribuídos para escalonamento em grades de dados

LOURENÇO, Gustavo Vilaça¹; TRAVIESO, G.¹

gustavo@ursa.ifsc.usp.br

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O uso de DataGrids (1) torna-se importante em experimentos que geram uma grande quantidade de dados, o que muito ocorre em áreas como Física, Biologia entre outras. Para que o uso desse "recurso" seja otimizado e possibilite cada vez mais experimentos sofisticados, devem-se utilizar algoritmos específicos (2) para esse tipo de ambiente e que gerenciem os dados de uma maneira eficaz, além de levar em consideração o posicionamento dos dados ao escalonar programas para execução nas máquinas. Buscando tal melhoria, propomos métodos que otimizem essas execuções, tendo sempre como principal fator o gerenciamento dos dados necessários. Como as grids lidam com grandes quantidades de recursos distribuídos, é necessário que os participantes nessas grids se interliguem por meio de uma rede. A forma com que essas conexões são determinadas é definida através de uma topologia (3). Analisando o efeito de algumas dessas topologias, pudemos observar que o desempenho dos algoritmos para a execução de processos está intimamente ligada com o grau que "caoticidade" da topologia.

Palavras-chave: Data grid. Replicação de dados. Escalonamento de processos.

Referências

1 CHERVENAK, A.; FOSTER, I.; KESSELMAN, C.; SALISBURY, C.; TUECKE, S. The data grid: towards an architecture for the distributed management and analysis of large scientific datasets. **Journal o Network and Computer Applications**, v. 23, n. 3, p. 187-200, 2000.

2 RANGANATHAN, K.; FOSTER, I. Simulation studies of computation and data scheduling algorithms for data grids. **Journal of Grid Computing**, v. 1, n. 1, p. 53–62, 2003. DOI: 10.1023/A:1024035627870.

3 BARABASI, A. L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. **Science**, v. 286, n. 5439, p. 509-512, 1999.

PG-87A - Processamento digital de sinais aplicado ao projeto de função de transferência inteligente para a solução de tempos de relaxação em problemas de RMN

QUEIROZ, Guylherme Emmanuel Tagliaferro de¹; GUIDO, Rodrigo C.¹
getqueiroz@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Desde o início dos anos noventa, várias aplicações envolvendo sistemas inteligentes têm surgido em diversas áreas do conhecimento científico. Dentre tais sistemas, as Redes Neurais Artificiais (RNAs) têm representado papel importantíssimo, sendo aplicadas com relativo sucesso na resolução de problemas onde os métodos tradicionais, de certa forma, mostram-se ineficientes, seja pela complexidade dos sistemas envolvidos ou mesmo pela existência de incertezas relacionadas. “A solução de problemas através de RNAs é bastante atrativa, já que a forma como eles são representados internamente pela rede, assim como o paralelismo natural inerente à arquitetura das RNAs, criam a possibilidade de um desempenho superior ao dos modelos convencionais. [...] A capacidade de aprender através de exemplos e de generalizar a informação aprendida é, sem dúvida, o atrativo principal da solução de problemas através de RNA (1)”. Tendo em vista o histórico de resultados positivos envolvendo a utilização de RNAs, busca-se, neste trabalho, aplicar e confrontar diversas arquiteturas e topologias de RNAs para solucionar um problema da área de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), particularmente a tentativa, que já demonstrou resultados animadores, é de criar uma função de transferência inteligente capaz de resolver uma equação envolvendo tempo de relaxação que, anteriormente, possuía apenas solução analítica, altamente custosa e, algumas vezes, inviável. Essa investigação se justifica devido à complexidade dos atuais métodos utilizados na solução destas equações. Em um primeiro momento serão apresentados os resultados da aplicação de Redes de Funções de Base Radial (RBF), sendo a técnica apresentada, uma adaptação de um algoritmo para conversão de voz (Voice Morphing), desenvolvido sob orientação do Prof. Dr. Rodrigo C. Guido (Speechlab-IFSC/USP).

Palavras-chave: Redes neurais artificiais. Processamento digital de sinais. Ressonância magnética nuclear.

Referências

1 BRAGA, A. P.; CARVALHO, A. P. L.; LUDELMIR, T. B. **Redes neurais artificiais:** teoria e aplicações. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2000. 262 p.

PG-88A - Influência de modelos de interação hâdronica na medida de composição de raios cósmicos

SOARES, Hendrik¹; DE SOUZA, Vitor¹

hendrik.soares@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Em raios cósmicos um dos aspectos mais difíceis é o estudo da massa da partícula primária. Algumas das possíveis razões são a grande flutuação natural na primeira interação e o incompleto conhecimento da seção de choque em energias superiores a 10^{14} eV. Uma das técnicas mais importantes para extrair a informação da massa do primário é o estudo da taxa de elongação de chuveiros atmosféricos extensos (CAE). Esta taxa de elongação é definida como a profundidade atmosférica no qual o CAE atinge o maior número de partículas (chamado máximo do chuveiro, Xmax) relacionado com a energia do primário deste mesmo CAE. Recentemente, o Observatório Pierre Auger publicou resultados da taxa de elongação com precisão suficiente para mostrar que em altas energias, ao redor de 10^{18} eV, a massa do primário tende a aumentar com a energia deste, indo de próton para energias mais baixas (10^{18} eV) a ferro para energias mais altas (10^{20} eV). Em minha pesquisa estou desenvolvendo simulações e modificando o simulador CORSIKA (COsmic Ray SImulations for Kascade), a fim de estudar a influência da seção de choque de interações hadrônicas (p-p) na taxa de elongação de um CAE correlacionando-a a massa do primário.

Palavras-chave: Raios cósmicos. Seção de choque. Taxa de elongação.

Referências

1 HECK, D. et al. **CORSIKA**: a Monte Carlo code to simulate air showers. Report KfK 6019, Forshungszentrum Karlsruhe, Feb.1998. Disponível em: <<http://bibliothek.fzk.de/zb/berichte/FZKA6019.pdf>>. Acesso em: Set. 2011.

2 ABRAHAM, J. et al. Measurement of the depth of maximum of extensive air showers above 10^{18} eV. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 9, p. 091101, March 2010.

PG-89A - Características locais no tráfego de pacotes em redes complexas próximo ao ponto de congestionamento

CARUSO, J. S.¹; TRAVIESO, G.¹

jeremihas.caruso@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

No trabalho aqui proposto não são analisadas as características globais do tráfego, como a presença ou não de congestionamento na rede como um todo, mas é feita uma análise sistemática das características locais (isto é, de roteadores específicos) do tráfego no ponto de transição entre a fase livre e a fase de congestionamento. Os estudos são realizados com o uso de um simulador de rede, para possibilitar um controle adequado dos parâmetros e uma avaliação de todas as características desejadas.

Palavras-chave: Redes complexas. Transição. Congestionamento.

Referências

- 1 TADIC, B.; THURNER, S.; RODGERS, G. J. Traffic on complex networks: towards understanding global statistical properties from microscopic density fluctuations. **Physical Review E**, v. 69, n. 3, p. 036102-1-036102-5, 2004.
- 2 DUCH, J.; ARENAS, A. Scaling of fluctuations in traffic on complex networks. **Physical Review Letters**, v. 96, n. 21, p. 218702, 2006.
- 3 TANG, X.; WONG, E. W. M.; WU, Z. Integrating network structure and dynamic information for better routing strategy on scale-free networks. **Physica A: statistical mechanics and its applications**, v. 388, n. 12, p. 2547-2554, 2009.

PG-90A - Transformada wavelet aplicada na extração das características do ruído emitido pela caneta ao assinar

ESCOLA, João Paulo Lemos¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

jpescola@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O ser humano está acostumado a se submeter a processos de validação para adentrar localidades restritas ou utilizar serviços. A Biometria é um processo de validação abrangente que emprega características humanas para obtenção de identificação pessoal. O processamento digital de sinais permite a extração de características de sinais, como áudio ou voz, podendo estas serem utilizadas para diferenciar um indivíduo de outro. Neste artigo apresentaremos uma aplicação da transformada Wavelet sobre sinais de áudio emitidos pela caneta durante o processo de assinatura, onde é possível caracterizar as frequências predominantes a fim de classificar os sinais e diferencia-los dentre um grupo de indivíduos.

Palavras-chave: Biometria. Processamento de sinais. Wavelet.

Referências

- 1 LARCO BRAVO, J. C. **Autenticação pessoal baseada no som da assinatura.** 2006. Dissertação (Mestrado em Engenharia Eletrica) - Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, Campinas,2006.

PG-91A - Modelagem de mercado financeiro através de redes complexas

SILVA JUNIOR, Luiz Gonzaga da¹; TRAVIESSO, Gonzalo¹

luiz.gonzaga.silva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Neste trabalho o objetivo é identificar, através dos métodos de Redes Complexas, padrões de ocorrência dentro das diversas relações que se originam nos Mercados Financeiros. O objetivo é construir modelos que possam de alguma forma dar apoio na aplicação de Engenharia Financeira, que consiste na aplicação de modelos matemáticos e de tecnologia de negócios a partir de computadores visando minimizar os Riscos atrelados aos investimentos.

Palavras-chave: Financeiro. Redes. Complexas.

Referências

- 1 JORION, P. **Value at risk**: nova fonte de referência para gestão do risco financeiro. 2a ed. São Paulo: BM&F, 2004. 487 p.
- 2 BRANDES, U.; ERLEBACH, T. **Network analysis**: methodological foundations Berlin: Springer-Verlag, 2005. (Lecture Notes in Computer Science, 3418).

PG-92A - Programação de um sistema de controle de RF e aquisição de dados para um espetrômetro de RMN de baixo custo

ANDREETA, Mariane Barsi¹; D'EURYDICE, Marcel Nogueira¹; VIDOTO, Edson L. G.¹; BONAGAMBA, Tito José¹

mariane.andreeta@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este projeto de mestrado visa construção de um espetrômetro de Ressonância Magnética Nuclear de baixo custo e facilmente portável. A utilização deste espetrômetro em nosso laboratório é destinada, principalmente, i) estudo de meios porosos com freqüência de ressonância centrada em 2 MHz, ii) ao desenvolvimento de experimentos de RMN em campo zero e RQN. Como o estudo de meios porosos requer um magneto de baixo campo para evitar problemas associados com a susceptibilidade magnética (1), a estrutura principal deste espetrômetro envolveu a construção de um magneto resistivo de 0,047 T, juntamente com a fonte de alimentação e os equipamentos de amplificação e filtragem. O controle do experimento é realizado por um processador de RF e sua API (Application Programming Interface) adquiridos da Empresa SpinCore. O projeto visou a construção de uma nova biblioteca que usa as funções básicas da API original e cria uma camada superior à ela simplificando seu uso, além do desenvolvimento de uma interface para visualização e tratamento dos dados. Esta biblioteca foi implementada na linguagem C++ com um wrapper para a linguagem script Python, permitindo que o usuário possa escolher entre construir o experimento através da programação de um script, ou uso da interface. A interface foi desenvolvida em PyQt e permite a construção das seqüências de pulso de forma clara e intuitiva. O equipamento e software foram testados através de experimentos de CPMG (2) para a caracterização de amostras porosas de ossos e uma amostra de rocha de arenito. Além disso, foi obtido o espectro de RQN do isótopo ^{35}Cl de uma amostra de monocristalina de KClO_3 na presença de um campo perturbativo de 10G (3) e o espectro em campo zero do ^{139}La em uma amostra de manganita de lantâncio dopada com estrôncio.

Palavras-chave: Meios porosos. Espectrômetro . Baixo campo.

Referências

- 1 DUNN, K. J.; BERGMAN, D. J.; LATOURRACA, G. A. **Nuclear magnetic resonance: petrophysical and logging applications**. Oxford: Elsevier Science, 2002.
- 2 MELBOOM, S.; GILL, D. Modified spin-echo method for measuring nuclear relaxation times. **Review of Scientific Instruments**, v. 29, n. 8, p. 688-691, 1958.
- 3 BAIN, A. D.; KHASAWANEH, M. From NQR to NMR: the complete range of quadrupole interactions. **Concepts Magnetic Resonance A**, v. 22, n. 2, p. 69-78, 2004. DOI: 10.1002/cmr.a.20013.

PG-93A - Autômato celular: criptografia baseada no modelo de vida artificial

JUSTO, Marina Jeaneth Machicao¹; BRUNO, Odemir M.¹

machicao@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Os autômatos celulares (AC) são sistemas discretos que podem apresentar comportamentos complexos e caóticos a partir de simples regras. Seu estudo foi inicialmente proposto para a simulação da evolução da vida, porém têm influenciado em várias áreas principalmente na Biologia, a Física, a Matemática, e a Computação (1). Desde que os AC possuem uma alta aplicabilidade para modelar sistemas reais que evoluem no tempo a partir de suas condições iniciais e de suas funções de transição (regras). Uma das aplicações destes modelos pode ser utilizada no cotidiano como, por exemplo, na proteção de informação: transações bancárias, comércio eletrônico, etc. Através do cifrado de mensagens (Criptografia), onde o AC é utilizado como um modelo gerador de números aleatórios. O objetivo deste trabalho é de poder analisar esses modelos de sistemas dinâmicos empregando a matemática necessária para atingir a maior segurança na criptografia. Aqui são estudados especificamente AC de duas dimensões baseados no modelo do "jogo da vida" de Conway (2) que apresentem comportamento caótico. A criptografia caótica introduzida por Baptista (3) combina a criptografia convencional com modelos matemáticos que apresentam comportamentos caóticos, para obter deles padrões não reconhecíveis para embaralhar as informações. A validação deste modelo de AC pode ser demonstrada pelas diferentes medidas: Entropia, Expoente de Lyapunov (4), Análise do Espectro de Fourier, Histogramas e pelos Testes de aleatoriedade (5). Os primeiros resultados obtidos indicam que os modelos de AC possuem uma alta complexidade, e qualidade como gerador de números aleatórios, característica que motiva sua utilização na criptografia.

Palavras-chave: Autômatos celulares. Criptografia. Caos.

Referências:

- 1 WOLFRAM, S. **A new kind of science**. Champaign, IL.: Wolfram Media Inc., 2002. 1197 p.
- 2 AGUENA, C. M. L.; DE OLIVEIRA, C. R. Autômatos celulares: implementações de Von Neumann, Conway e Wolfram. **Revista de Ciências Exatas e Tecnologia**, São Paulo, v. 3, n. 3, p. 89-106, 2008.
- 3 BAPTISTA, M. Cryptography with chaos. **Physics Letters A**, Maryland, v.240, p. 50-54, 1998.
- 4 BAETENS, J. M.; DE BAETS, B. Phenomenological study of irregular cellular automata based on Lyapunov exponents and Jacobians. **Chaos**, Belgium, v. 20, n. 3, p. 033112, 2010. DOI:10.1063/1.3460362.
- 5 SHENG, U. G.; SYN, K. T. Pseudorandom number generation with self-programmable cellular automata. **IEEE Transactions on Computer-aided Design of Integrated Circuits and Systems**, Singapore, v. 23, n. 7, p. 1095-1101, July 2004.

PG-94A - GaAs δ -doped: comparação entre as estruturas da banda de valência das fases zincblend e wurtzita

FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

fariajuniор.pe@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

GaAs é um composto III/V semicondutor binário amplamente utilizado na área tecnológica. Embora sua estrutura cristalina na forma \textit{bulk} seja zincblend (ZB), a estrutura wurtzita (WZ) tem sido observada em nanowhiskers politípicos (1). Dados experimentais para o GaAs na fase WZ ainda não estão disponíveis na literatura mas cálculos *ab initio* de sua estrutura de bandas já foram reportados em alguns artigos (2, 3). Especialmente no trabalho de Cheiwchanchamnangij e Lambrecht (3) além da estrutura de bandas *ab initio*, um *fitting* para a matriz k.p da WZ[0001] é realizado, disponibilizando os parâmetros necessários para cálculos. Baseado em conceitos de teoria de grupos e no método k.p (4) é possível representar as estruturas ZB[111] e WZ[0001] em uma mesma descrição matricial. O objetivo deste trabalho é investigar um sistema δ -doped de GaAs comparando a estrutura da banda de valência para as fases ZB[111] e WZ[0001].

Palavras-chave: GaAs. Método k.p. δ -doping.

Referências

- 1 CAROFF, P. et al. Controlled polytypic and twin-plane superlattices in III-V nanowires. **Nature Nanotechnology**, v. 4, n. 359, p. 50-55, 2009.
- 2 DE, A.; PRYOR, C. E. Predicted band structures of III-V semiconductors in the wurtzite phase. **Physical Review B**, v. 81, n. 15, p. 155210, 2010. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.155210.
- 3 CHEIWCHANCHAMNANGIJ, T.; LAMBRECHT, W. R. L. Band structure parameters of wurtzite and zinc-blende GaAs under strain in the GW approximation. **Physical Review B**, v. 84, n. 3, p. 035203, 2011. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.035203.
- 4 FARIA JUNIOR, P. E.; SIPAHI, G. M. Polytypic nanowhiskers: electronic properties in the vicinity of the band edges. Disponível em: <http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1012/1012.0227v2.pdf>. Acesso em: 08 set.2011.

PG-95A - Som e Código Aberto

FABBRI, Renato¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹; OLIVEIRA JÚNIOR, Osvaldo Novais de¹
renato.fabbri@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho é dedicado a expor os fundamentos do manuseio do som digitalizado através do software em código aberto e sua apropriação cultural. Iniciamos abordando como um todo o fenômeno físico (e psicofísico) do som, sua representação digital e os procedimentos clássicos de seu manuseio. Como ferramental básico, as linguagens de programação C/C++ e Python são usadas para a geração e processamento de áudio digital. Ainda no campo do software o ambiente de desenvolvimento Unix é descrito em síntese, coletando práticas comuns no uso de seu sistema herdeiro, o GNU/Linux. Neste ponto os browsers são então abordados devido à crescente similaridade com os sistemas operacionais. Os resultados antingidos envolvem diversos aplicativos para produção e experimentação em áudio e música. Outros desenvolvimentos consequentes destes conhecimentos se deram na área de tecnologias sociais, atingindo diversos coletivos e instituições, incluindo a própria ONU. Vale notar que, relacionada a esta produção, grupos civis estão se mobilizando. Em específico é relatada a criação do Lab Macambira em São Carlos, com ao menos 13 pessoas em ritmo de dedicação diária.

Palavras-chave: Som. Código. Cultura Digital.

Referências:

1 ROADS, C. **The computer music tutorial.** Canadá: MIT Press, 1996. ISBN-10: 0-262-68082-3

PG-96A – Análise do comportamento coletivo em redes complexas do mercado financeiro

PERON, Thomas¹; RODRIGUES, Francisco Aparecido¹

thomaskaue@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O Mercado financeiro pode ser tratado como um sistema complexo altamente interagente, sendo sensível a instabilidades econômicas e à emergência de comportamento coletivo. Neste trabalho, quantificamos esta dinâmica emergente utilizando conceitos de sincronização em redes complexas. Mais especificamente, definindo uma janela temporal, consideramos redes complexas construídas através da matriz de correlação de séries temporais de ativos financeiros, definindo ações como nós da rede e as ligações como sendo a correlação temporal entre cada par de ações. Movendo esta janela temporal de modo a gerar novas redes e tratando cada nó destes sistemas como um oscilador, estudamos a evolução temporal da coerência entre as fases dos nós, verificando que durante instabilidades financeiras um estado síncrono emerge no sistema, definindo um comportamento preferencial no mercado. Além do mais, este trabalho propõe um modelo de regressão estatístico capaz de identificar quais medidas topológicas destas redes mais influenciam na emergência do estado síncrono. Através dos coeficientes do modelo proposto, é indicado que o menor caminho médio entre nós quaisquer da rede é a medida mais fortemente relacionada à sincronização da rede. Tendo em vista estes resultados, durante crises econômicas, os preços de ativos financeiros tendem a apresentar uma evolução temporal similar, tendendo a minimizar a distância entre as ações, indicando a emergência de uma dinâmica coletiva.

Palavras-chave: Redes complexas. Mercado financeiro. Sincronização.

Referências:

- 1 AMARAL, L.; OTTINO, J. Complex networks. **The European Physical Journal B**: condensed matter and complex systems, Heidelberg, v. 38, n. 2, p. 147-162, 2004.
- 2 BOCCALETI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.; CHAVEZ, M.; HWANG, D. Complex networks: structure and dynamics. **Physics Reports**, v. 424, n. 4-5, p. 175-308, Feb. 2006.
- 3 COSTA , L.; RODRIGUES, F.; TRAVIESO, G.; BOAS, P. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n. 1, p. 167-242, 2007.
- 4 MANTEGNA, R. Hierarchical structure in financial markets. **The European Physical Journal B**: condensed matter and complex systems, Heidelberg, v. 11, n. 1, p. 193-197, 1999.

PG-97A - Simulação de sistemas semicondutores com computação heterogênea

CAMPOS, Tiago de¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

tiago.campos@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A simulação de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade, tais como pontos e fios quânticos, tem alto custo computacional, pois envolve a diagonalização de matrizes cujos tamanhos geralmente ultrapassam dezenas de milhares de elementos. O objetivo deste trabalho é acelerar este processo, substituindo as rotinas da biblioteca LAPACK por rotinas baseadas no método do gradiente conjugado (1) em uma formulação \textit{out-of-core}. Nesta formulação, as matrizes são escritas linha a linha e em seguida multiplicadas por vetores tentativos em uma GPU, explorando seu grande poder de computação paralela. A formulação teórica deste estudo é baseada no método k.p e na expansão em ondas planas (2) para a construção matricial do Hamiltoniano que irá descrever o sistema estudado. O método será aplicado em um sistema semicondutor, mostrando a eficiência do método para o cálculo de estrutura de bandas.

Palavras-chave: Semicondutores. GPU. Computação heterogênea.

Referências

- 1 SHEWCHUK, J. R. **An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain.** Disponível em: <<http://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf>>. Acesso em: 24 Aug. 2011.
- 2 SANTOS, E. M. S. **Cálculo de propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras quase zero-dimensionais quantum dots (QDs).** 2006. 71p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.

PG-98A - Métricas para filosofia e música

SILVA JUNIOR, Vilson Vieira da¹; FABBRI, Renato¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹
vilson@void.cc

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho trata do uso da análise quantitativa nas ciências humanas através de métodos estatísticos e lineares. Baseado em um método já aplicado para a análise histórica da filosofia através do legado individual dos filósofos (1), verificamos a aplicação desse mesmo método para a música. Este método se baseia na redução dimensional utilizando PCA e em medidas de distância que representam qualitativamente conceitos como oposição e dialética. Nesta abordagem, sete compositores foram escolhidos e analisados com respeito a oito características principais presentes em suas obras. Ambas as análises para a filosofia e a música foram comparadas e validadas. Diferenças em como se deram os desenvolvimentos históricos em cada uma dessas áreas foram identificadas e discutidas.

Palavras-chave: Música. Filosofia. Estatística.

Referências

1 FABBRI, R.; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.; COSTA, L. F. **Philosometrics**. Disponível em: <http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1010/1010.1880v2.pdf>. Acesso em: 13 Set. 2011.

PG-99A - Indo além da teoria de Forster em semicondutores orgânicos no estado sólido

FACETO, Angelo Danilo¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

faceto@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Embora a migração de excitons, ou de forma mais geral a transferência de energia eletrônica (EET), esteja na base de operação de uma série de dispositivos orgânicos, desde células solares orgânicas e LEDs às proteínas fotossintéticas, o modelo básico para EET sofreu mudanças substanciais nas últimas décadas e muitas sutilezas foram descobertas (1). A teoria Forster (FRET) se mostrou bem sucedida em predizer taxas de EET entre cromóforos doadores e aceitadores, tanto quando dispersas em solução e quando ligadas para sítios de proteína. No entanto, em sistemas de muitos cromóforos, especialmente no estado sólido, as aproximações utilizadas no modelo padrão não são mais válidas. Isto levou a uma série de novas aproximações desenvolvidas na última década incorporando vários efeitos que vão além da teoria usual Forster (2). Neste trabalho nós comparamos diferentes métodos para calcular o acoplamento entre cromóforos indo além da aproximação de dipolo pontual (PDA) considerada na Teoria de Forster, especificamente a aproximação de dipolo linear (LDA) (3) e à aproximação de monopolo distribuído (DMA) (4). Além disso, realizamos simulações utilizando um modelo de sistema molecular sólido com desordem gaussiana na energia de gap para comparar a dinâmica da migração exciton e espectros de emissão (e emissão resolvida no tempo) utilizando taxas de transferência derivadas nas primeiras duas aproximações.

Palavras-chave: Transferencia de energia. Éxciton. Polímeros conjugados.

Referências

- 1 BELJONNE, D.; CURUTCHET, C.; SCHOLES, G. D.; SILBEY, R. J. Beyond Förster resonance energy transfer in biological and nanoscale systems. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 113, n. 19, p. 6583-6599, 2009.
- 2 OLAYA-CASTRO, A.; SCHOLES, G. D. Energy transfer from Forster-Dexter theory to quantum coherent light-harvesting. **International Reviews in Physical Chemistry**, v. 30, n. 1, p. 49-77, 2011.
- 3 BARFORD, W. Exciton transfer integrals between polymer chains. **The Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 13, p. 134905-1-134905-6, 2007.
- 4 CHANG, J. C. Monopole effects on electronic excitation interactions between large molecules. I. application to energy transfer in chlorophylls. **The Journal of Chemical Physics**, v.67, n. 9, p. 3901-1-3901-9, 1977. DOI:10.1063/1.435427.

PG-99B - Going beyond Forster energy transfer theory in solid state organic semiconductors

FACETO, Angelo Danilo¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

faceto@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Although Exciton Migration, or more broadly speaking Electronic Energy Transfer (EET), underpins the operation of a series of organic devices, from Organic solar cells and LEDs to photosynthetical proteins, the basic model for EET have sustained substantial changes over the past decades and many subtleties been discovered (1). The Forster theory (FRET) has been proved successful in predicting EET rates between chromophores in donor-acceptor system both when dispersed in solution and when bond to protein sites. However, in multichromophoric systems, especially in solid state, the approximations used in the model are not valid anymore. This led to a series of new approximations been developed in the past decade adding several effects that go beyond usual Forster theory (2). We compared different methods for computing the coupling between chromophores beyond the simple point dipole approximation (PDA) considered in the Forster's Theory, namely the line-dipole approximation (LDA) (3) and the distributed monopole approximation (DMA) (4). Furthermore we run simulations using a model molecular solid system to compare the dynamics of the exciton migration and emission spectra (and time resolved PL) within the first two approximations.

Keywords: Energy transfer. Exciton. Conjugated polymers.

References

- 1 BELJONNE, D.; CURUTCHET, C.; SCHOLES, G. D.; SILBEY, R. J. Beyond Förster resonance energy transfer in biological and nanoscale systems. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 113, n. 19, p. 6583-6599, 2009.
- 2 OLAYA-CASTRO, A.; SCHOLES, G. D. Energy transfer from Forster-Dexter theory to quantum coherent light-harvesting. **International Reviews in Physical Chemistry**, v. 30, n. 1, p. 49-77, 2011.
- 3 BARFORD, W. Exciton transfer integrals between polymer chains. **The Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 13, p. 134905-1-134905-6, 2007.
- 4 CHANG, J. C. Monopole effects on electronic excitation interactions between large molecules. I. application to energy transfer in chlorophylls. **The Journal of Chemical Physics**, v.67, n. 9, p. 3901-1-3901-9, 1977. DOI:10.1063/1.435427.

PG-100A - Técnicas de RMN para estudos de materiais de interesse energético

ARAUJO-FERREIRA, Arthur Gustavo de¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de¹; BONAGAMBA, Tito José¹
avatar@if.sc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A ressonância magnética nuclear é uma ferramenta que se mostrou extremamente eficiente na caracterização da estrutura e comportamento de materiais de diversas áreas, como na construção civil ou corpo humano. Este trabalho objetiva o desenvolvimento e utilização de técnicas de ressonância magnética nuclear no estudo de materiais porosos, como por exemplo, membranas poliméricas ionoméricas condutoras de prótons, para uso em células a combustível e polímeros condutores iônicos, para a aplicação em baterias recarregáveis contendo eletrólitos de sais de lítio. Para o emprego em células combustível poliméricas foram testadas membranas de Nafion 115 e 212 e pretende-se utilizar as mesmas técnicas para membranas a base de polibenzimidazol. No campo de polímeros condutores iônicos foram estudados tanto materiais mais conhecidos como polietilenoglicol diesterato, como também, novos polímeros desenvolvidos a partir de uma combinação entre polietilenoglicol, metacrilato e poliestireno, esperando-se criar um eletrólito sólido com boas características de condutividade e durabilidade. Foram utilizadas técnicas de espectroscopia de alta resolução além de técnicas de relaxometria e de difusão, com o emprego de sequências de pulsos de gradientes. Com a aplicação destes recursos objetivamos o conhecimento preciso do comportamento difusivo e estruturação dos materiais estudados, e como resultado final determinar as melhorias das propriedades de interesse de acordo com sua fabricação.

Palavras-chave: Condutores iônicos. Relaxometria. Nafion.

Referências

- 1 STEJSKAL, E. O.; TANNER, J. E. Spin diffusion measurements: spin echoes in the presence of a time-dependent field gradient. **Journal of Chemical Physics**, v. 42, n. 1, p. 288-292, 1965. DOI: 10.1063/1.1695690.
- 2 GEBEL, G. Structural evolution of water swollen perfluorosulfonated ionomers from dry membrane to solution. **Polymer**, v. 41, n. 15, p. 5829-5838, July 2000. DOI: 10.1016/S0032-3861(99)00770-3.
- 3 CALLAGHAN, P. T. et al. Diffraction-like effects in NMR diffusion studies of fluids in porous solids. **Nature**, v. 351, n. 6326, p. 467-469, June 1991. DOI: 10.1038/351467a0.
- 4 YE, G.; HAYDEN, C. A.; GOWARD, G. R. Proton dynamics of nafion and Nafion/SiO₂ composites by solid state NMR and pulse field gradient NMR. **Macromolecules**, v. 40, n. 5, p. 1529-1537, Mar. 2007. DOI: 10.1021/ma0621876.

PG-101A - Aprisionamento de átomos e dímeros de Rb em uma armadilha óptica

MARANGONI, Bruno Spolon¹; MENEGATTI, Carlos Renato¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹
bruno_marangoni@ursa.if.sc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Vários experimentos envolvendo moléculas homonucleares e heteronucleares ultrafrias partem do princípio da fotoassociação atômica. A fim de obtermos uma grande amostra molecular, é necessário começarmos com uma amostra atômica densa. Em nosso experimento, aprisionamos átomos e dímeros de Rb em uma armadilha óptica cruzada utilizando um laser banda larga. As configurações da nossa armadilha consistem em dois feixes cruzados com potência de 25 W (comprimento de onda de 1064 nm e largura de banda de 2 nm) com 50 μm de raio de cintura no foco em cada braço, acarretando em uma profundidade de aproximadamente 760 μK . Nossos resultados sugerem que os átomos aprisionados na armadilha óptica estão sendo fotoassociados pelo laser de 1064 nm, limitando o tempo de vida da amostra. Desenvolvemos também uma técnica que utiliza um trem de pulsos de laser para observar a evolução temporal das moléculas de Rb₂ na armadilha. Este trem de pulsos de laser fotoioniza as moléculas através da absorção ressonante de dois fôtons. Essa técnica é implementada de tal forma que nos permite observar continuamente a amostra molecular, diminuindo consideravelmente o tempo de aquisição de dados (1).

Palavras-chave: Armadilha óptica. Moléculas. Fotoassociação.

Referências

1 MENEGATTI, C. R.; MARANGONI, B. S.; MARCASSA, L. G. Observation of cold Rb₂ molecules trapped in an optical dipole trap using a laser pulse train technique. **Physical Review A**, 2011. In press.

PG-102A - Descrição de medidas em sistemas de 2 níveis pela equação de Lindblad com inclusão de ambiente

BRASIL, Carlos Alexandre¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹

carlosbrasil@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos (IFSC) - Universidade de São Paulo (USP)

O objetivo deste trabalho é explorar um modelo para medidas quânticas de duração finita baseado na equação de Lindblad (1), com a análise de um sistema de 2 níveis acoplado a um reservatório térmico que ocasiona decoerência. A interação entre o sistema e o dispositivo de medida é markoviana, justificando o uso da equação de Lindblad para obter a dinâmica do processo de medida (2). Para analisar a influência do ambiente produzida pelo ambiente/reservatório térmico não-markoviano, cuja definição não inclui o aparato de medida, foi utilizada a abordagem de Redfield para a interação entre o sistema e o ambiente (3). Na teoria híbrida aqui exposta, para efetuar o traço parcial dos graus de liberdade do ambiente foi desenvolvido (4) um método analítico baseado na álgebra de super-operadores e no uso dos operadores de Nakajima-Zwanzig (5-6). Foi verificado que medidas de duração finita sobre o sistema aberto de 2 níveis podem proteger o estado inicial dos efeitos do ambiente, desde que o observável medido não comute com a interação (7). Quando o observável medido comuta com a interação sistema-ambiente, a medida de duração finita acelera a decoerência induzida pelo ambiente (4, 7). A validade das previsões analíticas foi testada comparando os resultados com uma abordagem numérica exata. Quando o acoplamento entre o sistema e o aparato de medida excede a faixa de validade da aproximação analítica, o estado inicial ainda é protegido pela medida de duração finita, como indicam os cálculos numéricos exatos (7).

Palavras-chave: Teoria quântica da medida. Álgebra de super-operadores. Equação de Lindblad.

Referências

- 1 LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. **Communications in Mathematical Physics**, Berlin, v. 48, n. 2, p. 119-130, 1976.
- 2 PERCIVAL, I. **Quantum state diffusion**. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 190 p.
- 3 BEUER, H-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2002. 650 p.
- 4 BRASIL, C. A.; NAPOLITANO, R. D. J. **The master equation for the reduced open-system dynamics, including a Lindbladian description of finite-duration measurement**. Disponível em: <http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1102/1102.3667v3.pdf>. Acesso em 2011.
- 5 NAKAJIMA, S. On quantum theory of transport phenomena. **Progress of theoretical physics**, Kyoto, v. 20, n. 6, p. 948-959, 1958.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

6 ZWANZIG, R. Ensemble method in the theory of irreversibility. **The Journal of Chemical Physics**, Lancaster, v. 33, p. 1338-1341, 1960. DOI:10.1063/1.1731409.

7 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. D. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, n. 2,p. 022112, 2011. Disponível em: <http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1106/1106.4537v2.pdf>. Acesso em: nov.2011.

PG-102B - Analysis of the environmental influence on the measurement process of a qubit sy

BRASIL, Carlos Alexandre¹; NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus¹

carlosbrasil@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos (IFSC) - Universidade de São Paulo (USP)

The aim of this work is to explore a model for finite-time measurement based on the Lindblad equation (1), with analysis of a system consisting of a qubit coupled to a thermal reservoir. We assume a Markovian measuring device and, therefore, use a Lindbladian description for the measurement dynamics (2). For studying the case of noise produced by a non-Markovian environment, whose definition does not include the measuring apparatus, we use the Redfield approach to the interaction between system and environment (3). In the present hybrid theory, to trace out the environmental degrees of freedom, we introduce (4) an analytic method based on superoperator algebra and Nakajima-Zwanzig projectors (5, 6). We show that measurements of finite duration performed on an open two-state system can protect the initial state from a phase-noisy environment, provided the measured observable does not commute with the perturbing interaction (7). When the measured observable commutes with the environmental interaction, the finite-duration measurement accelerates the rate of decoherence induced by the phase noise(4, 7). We have tested the validity of the analytical predictions against an exact numerical approach. When the coupling between the system and the measuring apparatus increases beyond the range of validity of the analytical approximation, the initial state is still protected by the finite-time measurement, according with the exact numerical calculations (7).

Keywords: Quantum measurement theory. Superoperator algebra. Lindblad equation.

Referências

- 1 LINDBLAD, G. On the generators of quantum dynamical semigroups. **Communications in Mathematical Physics**, Berlin, v. 48, n.2, p. 119-130, 1976.
- 2 PERCIVAL, I. **Quantum state diffusion**. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 190 p.
- 3 BEUER, H-P.; PETRUCCIONE, F. **The theory of open quantum systems**. Oxford: Oxford University Press, 2002. 650 p.
- 4 BRASIL, C. A.; NAPOLITANO, R. D. J. The master equation for the reduced open-system dynamics, including a Lindbladian description of finite-duration measurement Disponível em: <http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1102/1102.3667v3.pdf>. Acesso em 2011.
- 5 NAKAJIMA, S. On quantum theory of transport phenomena. **Progress of theoretical physics**, Kyoto, v. 20, n. 6, p. 948-959, 1958.

6 ZWANZIG, R. Ensemble method in the theory of irreversibility. **The Journal of Chemical Physics**, Lancaster, v. 33, p. 1338-1341, 1960. DOI:10.1063/1.1731409.

7 BRASIL, C. A.; DE CASTRO, L. A.; NAPOLITANO, R. D. J. Protecting a quantum state from environmental noise by an incompatible finite-time measurement. **Physical Review A**, v. 84, n. 2,p. 022112, 2011. Disponível em:< http://arxiv.org/PS_cache/arxiv/pdf/1106/1106.4537v2.pdf>. Acessoem: nov.2011.

PG-103A – Obtenção e polarização de bases Gaussianas relativísticas para cálculos atômicos e moleculares com átomos pesados

TARGON, Cristiane Godoy¹; SILVA, Albérico Borges Ferreira da²
crisgt@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

² Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

Atualmente, devido à disponibilidade de recursos computacionais para resolver a equação de Dirac, tem crescido o interesse por cálculos atômicos e moleculares com átomos pesados. Para esses átomos ($Z > 56$), a obtenção de funções de base eficientes é ainda um campo de pesquisa em aberto. Estamos estudando o formalismo utilizado na obtenção dessas bases e fazendo uma comparação com outros métodos disponíveis tanto no caso relativístico quanto não relativístico. Também estamos nos familiarizando com sua resolução computacional, que envolve a discretização das equações integrais no Método da Coordenada Geradora Dirac-Fock (1). O objetivo desse projeto é a obtenção de bases gaussianas mais compactas para átomos pesados por serem extremamente úteis em cálculos relativísticos de propriedades atômicas e moleculares (2). Também buscaremos qual a metodologia mais adequada para a polarização dessas bases.

Palavras chaves: Átomos pesados (lantanídeos/actinídeos). Cálculos atômicos. Cálculos moleculares. Bases gaussianas relativísticas. Método da coordenada geradora.

Referências:

- 1 MOHALLEM, J. R. **Solução por discretização integral de equações de griffin-hill-wheeler monoeletônicas.** 1987. 118 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1987.
- 2 SILVA, A. B. F. **Formalismo e aplicações do método da coordenada geradora hartree-fock e método da coordenada geradora Dirac-Fock na geração de funções de base para cálculos ab-initio de propriedades eletrônicas de átomos e moléculas.** 1997. 96 p. Tese (Livre Docência) – Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1997.

PG-104A - Absorção cooperativa de dois fótons por átomos de sódio numa armadilha magneto-óptica

PEDROZO, Edwin Eduardo¹; PAIVA, Rafael Rothganger¹; MAGALHÃES, Kilvia Mayre Farias¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
edwin@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Neste trabalho estudamos a absorção cooperativa de dois fótons (1) em processos de colisão entre átomos frios de sódio aprisionados. A nossa amostra é conseguida utilizando a técnica de armadilha magneto-óptica, e tem uma densidade da ordem de 10^{12} átomos/cm³. Para esse experimento foram feitas algumas alterações ao sistema experimental, tais como a construção de um desacelerador Zeeman em configuração spin-flip, a implementação de bombeamento diferencial entre o forno e a câmara principal, assim como redesenhar o forno (2). A fim de compreender e melhorar os processos de medição utilizamos a técnica de fotoionização (3) nos estados $3^2P_{1/2}$ e $3^2P_{3/2}$. Com esses dados conseguimos calcular a seção transversal de ionização para cada um desses estados, que está de acordo com valores reportados na literatura (4). Estes resultados mostram que o novo desenho do sistema permite um grande ponto de partida para a medição da absorção de dois fótons. Uma tentativa de medir a absorção de dois fótons foi feita. Um pequeno aumento no número de íons produzidos por unidade de tempo foi observada em uma região deslocada para o vermelho de cerca de 4,5 GHz de onde inicialmente se esperava ocorrer a transição. Isto motiva a aprofundar o estudo da absorção de dois fótons, já que provavelmente essa medida seja um indício da ocorrência desse fenômeno. Assim, tanto a medição da seção de choque dos estados $3^2P_{1/2}$ e $3^2P_{3/2}$ e a tentativa de medir a absorção de dois fótons, fornecem uma base sólida para conhecer qual é a melhor maneira de obter resultados mais decisivos no que diz respeito à absorção cooperativa de dois fótons, e as vantagens do nosso sistema em futuros experimentos.

Palavras-chave: Dois fótons. Armadilha magneto-óptica. Átomos frios.

Referências

1 RIOS LEITE, J. R.; ARAUJO, C. B. Lineshape of cooperative two-photon absorption by pairs in solids. **Chemical Physics Letters**, v. 73, n. 1, p. 71–74, July 1980.

2 NAIK, D. S. Bose-Einstein condensation: building the testbeds to study superfluidity. 2006. 193p. Ph.D. Thesis (Physics) - School of Physics, Georgia Institute of Technology, Georgia, 2006.

3 PAIVA, R. R. et. al Photoassociative ionization of cold Na atoms: repulsive levels effects on the ion production rate. **Laser Physics Letters**, v. 6, n. 2, p. 63–167, Feb. 2009.

4 PETROV, I. D. et. al. Near threshold photoionization of excited alkali atoms Ak(np) (Ak=Na, K,



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

Rb, Cs; n= 3-6). **European Physical Journal D**, v. 10, n. 1, p. 53–65, Apr. 2000.

PG-105A - Interação entre um ponto quântico de InAs com plasmon polariton de superfície numa interface metal semicondutor

SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar¹; MAREGA JUNIOR, Euclides¹
fernandowellysson@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

É proposto um modelo teórico que descreve o acoplamento dos níveis de um ponto quântico (PQ) de InAs com um Plasmon Polariton de Superfície (SPP) numa nanoestrutura híbrida metal-semicondutor. O acoplamento radioativo entre uma onda eletromagnética e os estados de energia dá origem a efeitos óptico-quânticos fundamentais, como divisão dos modos normais e o efeito Purcell, que têm sido observados para vários sistemas quânticos (1-3), de átomos simples a nanoestruturas semicondutoras. Quando um modo SPP é ressonante com as transições do exciton, dois regimes podem ser distinguidos (4). Eles se originam da competição entre o acoplamento SPP-exciton e da defasagem das transições de cada tipo de excitação. O modelo fenomenológico de um oscilador acoplado (5) que prevê a força de acoplamento em estruturas com dessintonia otimizada entre as ressonâncias do exciton e do SPP foi desenvolvido. Inicialmente, foi feita uma simulação num buraco esférico simples utilizando o software COMSOL Multiphysics® para calcular a distribuição do campo eletromagnético, na aproximação de campo próximo, dentro do buraco. Um PQ esférico dentro do buraco interage com os dipolos induzidos pelo campo próximo na interface metal-semicondutor. A força do oscilador do estado fundamental para o estado excitado foi calculada sob a influência da radiação eletromagnética em ressonância com a transição do PQ.

Palavras-chave: Plasmonpolariton de superfície. Exciton. Ponto quântico.

Referências

- 1 OKAMOTO, K.; VYAWAHARE, S.; SCHERER, A. Surface-plasmon enhanced bright emission from CdSe quantum-dot nanocrystals. **Journal Optical Society American B**, v. 23, n. 8, p.1674-1678, Aug. 2006.
- 2 NEOGI, A. et al. Enhancement of spontaneous emission recombination rate in a quantum well by resonant surface plasmon coupling **Physical Review B**, v. 66, p. 153305,2002. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.153305.
- 3 GONTIJO, I. et al. Coupling of InGaN quantum well photoluminescence to silver surface plasmons. **Physical Review B**, v. 60, n. 16, p. 11564, 1999. DOI:10.1103/PhysRevB.60.11564
- 4 GOMEZ, D. E.; VERNON, K. C.; MULVANEY, P.; DAVIS, T. J. Surface plasmon mediated strong exciton-photon coupling in semiconductor nanocrystals. **Nano Letters**, v. 10, n. 1, p. 274-78, 2010.
- 5 VASA, P. et al. Coherent exciton-surface-plasmon-polariton interactin in hybrid metal-semiconductor nanostructures. **Physical Review Letters**, v. 101, n. 11, p. 116801, Sept. 2008.

PG-106A - Indução magnética produzida por uma amostra quântica mesoscópica

CUEVAS, Freddy Jackson Poveda¹; SEMAN, Jorge Amín¹; CASTILHO, Patricia¹

fjpovedac@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Apresentamos uma proposta para estudar propriedades magnéticas numa amostra ultra-fria de átomos de ^{87}Rb . Os átomos de ^{87}Rb estão magneticamente polarizados devido ao spin total e cada um deles comporta-se como um dipolo. Da magnetização total do gás diluído de ^{87}Rb podemos extrair informação sobre as propriedades da amostra na fase de degenerescência quântica, conhecida como condensação de Bose-Einstein. Pretendemos investigar como o gás interage com circuitos elétricos externos mediante indução magnética. Nesta etapa, que ocorre após da condensação, produziremos um deslocamento da nuvem usando uma armadilha de dipolo ou armadilha óptica (1), aumentando a indução e medindo o campo magnético criado num circuito elétrico indutor. Basicamente, temos um objeto magnetizado passando pelo circuito de aproximadamente 3 cm de diâmetro, que produz uma leve corrente de dezenas de pA. Esta corrente pode ser convenientemente detectada por um sistema tipo SQUID (2) (do inglês: *superconducting quantum interference device*) que deverá fazer parte do novo sistema experimental. Acreditamos que será possível detectar uma transição de fase quântica analisando o sinal de indução, o qual revelará novos aspectos globais do sistema.

Palavras-chave: Átomos ultra-frios. Condensação de Bose-Einstein. Indução magnética.

Referências

- 1 ASHKIN, A. Trapping of atoms by resonance radiation pressure. **Physical Reviews Letters**, v. 40, n. 12, p. 729-732, 1978.
- 2 KOBAYASHI, T. et al. **Vortex electronics and SQUIDs**. Berlin: Springer, 2003. 141 p.

PG107A - Tunelamento dissipativo não-local para transferência de estados com alta fidelidade

MORAES NETO, Gentil Dias de¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

gdmneto@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Propomos um protocolo para transferência de estado entre sistemas com separação espacial utilizando o tunelamento não-local. O tunelamento não-local resulta da sobreposição entre as funções de onda do sistema emissor-receptor que é indiretamente mediada pelos modos normais não-resonante do canal de quântico. Este canal é construído a partir de uma rede de sistemas dissipativos quânticos exibindo a mesma natureza bosônica ou fermionica do sistema emissor-receptor. Nós demonstramos que os efeitos incoerentes das não idealidade do canal quântico são quase completamente contornados pelo mecanismo de tunelamento o que permite obter alta fidelidade no processo de transferência.

Palavras-chave: Informação quântica. Computação quântica. Decoerência.

Referências

1 PONTE, M. A. et al. Networks of dissipative quantum harmonic oscillators: a general treatment. **Physical Review A**, v. 76, n. 3, p. 032101, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevA.76.032101.

2 PLENIO, M. B.; SEMIAO, F. L. High efficiency transfer of quantum information and multi-particle entanglement generation in translation invariant quantum chains. **New Journal of Physics**, v. 7, p. 73-78, 2005. DOI:10.1088/1367-2630/7/1/073.

PG107B - Nonlocal dissipative tunneling for high-fidelity quantum state transfer between distant parties

MORAES NETO, Gentil Dias de¹; MOUSSA, Miled Hassan Youssef¹

gdmneto@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

In this work we propose the nonlocal tunneling mechanism for high-fidelity state transfer between distant interplayers. The nonlocal tunneling follows from the overlap between the distant sending and receiving wave functions which is indirectly mediated by the off-resonant normal modes of a required quantum channel. This channel is built up from a network of dissipative quantum systems exhibiting the same bosonic or fermionic statistical nature as the sending and the receiving. We demonstrate that the incoherent effects of the quantum channel nonidealities are almost completely circumvented by the tunneling mechanism which thus renders a high-fidelity transfer process.

Keywords: Quantum information. Quantum computation. Decoherence.

References

- 1 PONTE, M. A. et al. Networks of dissipative quantum harmonic oscillators: a general treatment. **Physical Review A**, v. 76, n. 3, p. 032101, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevA.76.032101.
- 2 PLENIO, M. B.; SEMIAO, F. L. High efficiency transfer of quantum information and multi-particle entanglement generation in translation invariant quantum chains. **New Journal of Physics**, v. 7, p. 73-78, 2005. DOI:10.1088/1367-2630/7/1/073.

PG-108A - Uma generalização do modelo de spins e bósons para a transcrição de genes sob múltiplo controle

INNOCENTINI, Guilherme da Costa Pereira¹; HORNOS, José Eduardo Martinho¹

innocentini@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O modelo estocástico de spins e bósons (1) descreve um gene sujeito ao controle repressivo de um tipo de proteína. Ele foi resolvido analiticamente, tanto para o caso em que o gene é auto-regulante (2), quanto para o caso em que o gene é controlado por fatores externos (3). Simetrias nas equações de movimento foram identificadas (4) e soluções dependentes do tempo foram obtidas (5). Neste projeto desenvolveremos um modelo para situações em que existem várias configurações de controle e não apenas duas, como na formulação original.

Palavras-chave: Estocasticidade. Expressão gênica. Soluções exatas.

Referências

- 1 SASAI, M.; WOLYNES, P. G. Stochastic gene expression as a many-body problem. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 100, n. 5, p. 2374-2379, 2003.
- 2 HORNOS, J. E. M.; SCHULTZ, D.; INNOCENTINI, G. C. P.; WANG, J.; WALCZAK, A. M.; ONUCHIC, J. N.; WOLYNES, P. G. Self-regulating gene: an exact solution. **Physical Review E**, v. 72, n. 5, p. 051907, 2005.
- 3 INNOCENTINI, G. C. P.; HORNOS, J. E. M. Modeling stochastic gene expression under repression. **Journal of Mathematical Biology**, v. 55, n. 3, p. 413-431, 2007.
- 4 RAMOS, A. F.; HORNOS, J. E. M. Symmetry and stochastic gene regulation. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 10, p. 108103, 2007.
- 5 RAMOS, A. F.; INNOCENTINI, G. C. P.; HORNOS, J. E. M. Exact time-dependent solutions for a self-regulating gene . **Physical Review E**, v. 83, n. 6, p. 062902, 2011.

PG-109A - Um modelo estocástico para a transcrição dos genes de segmentação da *Drosophila melanogaster*

PRATA, Guilherme¹; HORNOS, José Eduardo Martinho¹

blane@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Sabemos que a informação genética codificada no DNA é expressa em termos de proteínas. Isto envolve primeiramente um processo de transcrição de sequências contidas no DNA na forma de um RNA que, posteriormente, é traduzido em proteína. Sabemos também que nem todos os genes em todas as células são expressos a todo momento e, de fato, muito da vida depende desta capacidade. De modo geral, qualquer passo da expressão de um gene pode ser regulado. Isso significa que, durante todo o caminho percorrido pelas informações que codificam proteínas, podem ocorrer modificações, como alterações químicas e estruturais no DNA e/ou na cromatina, alterações na transcrição (ou mesmo depois desta), no transporte e degradação de RNA e mesmo após a tradução. Em nosso trabalho, concentramo-nos no estudo da regulação gênica no início da transcrição e pretendemos usar um modelo estocástico para a segmentação da *Drosophila*, localizadamente tomando como ponto de partida as concentrações experimentais e/ou teóricas e introduzindo as flutuações. Observa-se que as flutuações no processo de segmentação ainda não foram experimentalmente observadas (ou encontram-se mascaradas nos experimentos). Destarte, a previsão dessas flutuações ainda que seja no contexto mais geral possível são de grande importância na comunidade.

Palavras-chave: *Drosophila*. Transcrição. Estocástico.

Referências

- 1 HORNOS, J. E. M. et al. Self-regulating gene: an exact solution. **Physical Review E**, v. 72, n. 5, p. 051907, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevE.72.051907.
- 2 INNOCENTINI, G. C. P.; HORNOS, J. E. M. Modeling stochastic gene expression under repression. **Journal of Mathematical Biology**, v. 55, n. 3, p. 413-431, 2007.
- 3 REINITZ, J. et al. Quantitative and predictive model of transcriptional control of the *Drosophila melanogaster* even skipped gene. **Nature Genetics**, v. 38, n. 10, p. 1159-1165, 2006.

PG - 110A - Colisão de átomos de Rydberg frios em uma armadilha de dipolo

CABRAL, Jader de Souza¹; KONDO, Jorge D. M.¹; GONÇALVES, Luis Felipe¹; MARCASSA, Luis Gustavo¹

jadersc@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nós construímos um novo aparato experimental para investigar colisão entre átomos de Rydberg frios em uma amostra de alta densidade atômica numa armadilha de dipolo de CO₂. A partir do vapor atômico provido por dispensers carregamos uma armadilha magneto óptica padrão de átomos de Rb. Então ligamos um laser de CO₂ de 100W de potência e iniciamos a fase de carregamento do dipolo, na qual a o laser de rebombeio tem sua intensidade reduzida. Depois desta fase, os lasers de aprisionamento e rebombeio são desligados e esperamos 100ms para que os átomos que não foram presos caiam sob ação da gravidade deixando assim a região de aprisionamento do dipolo. Finalmente, nós desligamos a armadilha de dipolo e excitamos os estados de Rydberg usando uma transição fotônica. Os átomos de Rydberg são detectados por meio da técnica de campo ionizante. Neste novo aparato experimental, nós podemos obter a imagem dos íons usando um detector MCP e estudar distribuição espacial dos mesmos. Os elétrons podem ser detectados por outro MCP também presente. Durante a apresentação nós mostraremos resultados preliminares envolvendo a excitação de estados nD + nD (1).

Palavras-chave: Rydberg. Átomos frios. Armadilha de dipolo.

Referências

1 CABRAL, J. S.; KONDO, J. M.; GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G.; BOOTH, D.; TALLANT, J; SHAFFER, J. P. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 093023, p. 1-15, 2010. DOI: 10.1088/1367-2630/12/9/093023.

2 MUDRICH, M. **Interactions in an optically trapped mixture of ultracold lithium and cesium atoms**: thermalization, spin-exchange collisions and photoassociation. 2003. 186 p. Ph. D. Thesis (Physics) - Universidade de Heidelberg, Heidelberg, 2003.

PG-111A – Geração de alto fluxo de harmônicos de alta ordem com pulsos de femtosegundo ultra-intensos

SIQUEIRA, Jonathas de Paula¹; MISOGUTI, Lino¹

jonathasusp@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O dobramento da frequência de uma fonte de luz laser foi um dos primeiros fenômenos observados logo após a invenção do laser mais de 50 anos atrás. Desde então, um dos desafios da óptica não-linear tem sido alcançar comprimentos de onda cada vez mais curtos através de processos de conversão coerente de freqüência. A intensa pesquisa no campo de geração de altos harmônicos tem descoberto formas viáveis de gerar raios-X com fluxos aplicáveis utilizando lasers de femtosegundos de pequena escala [1]. Neste trabalho serão apresentados alguns resultados obtidos em experimentos de geração de altos harmônicos com lasers de femtosegundo de altíssima energia por pulso, duração ultracurta e alta taxa de repetição (20mJ, 25fs e 1KHz). A intensidade de pico gerada por tal sistema laser é capaz de propiciar geração de altos harmônicos de altas energias e fluxo suficientes para diversas aplicações tais como observação das dinâmicas mais rápidas (attosegundos) em átomos, moléculas e superfícies e imagiamento de estruturas nanométricas que se beneficiam da alta resolução propiciada por estes raios-X coerentes.

Palavras-chave: Femtosegundo. Altos harmonicos. Coerente.

Referências

- 1 CHEN, M. C. et al. Bright, coherent, ultrafast soft X-ray harmonics spanning the water window from a tabletop light source. **Physical Review Letters**, v. 105, n. 17, p. 173901-1-173901-4, 2010.

PG-112A - Interações entre átomos de Rydberg em sistemas unidimensionais e bidimensionais

KONDO, J. D. M.¹; MARCASSA, L. G.¹

massayuki_kondo@hotmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Amostras de átomos de Rydberg frios têm sido propostas como sistemas ideais para realização de computação quântica. Isto se deve ao fato destes átomos apresentarem interações de ultralongo alcance, em geral para um número quântico principal variando entre 30 e 70. Fazendo uso de tal interação várias propostas teóricas utilizam os estados internos destes átomos para gerar o emaranhamento, e assim criar o qubit. Contudo, recentemente o Laboratório de Interações Atômicas - LIA têm investigado situações onde tais interações podem levar ao surgimento de ressonâncias moleculares (1). Tais ressonâncias podem destruir a coerência do sistema e consequentemente o qubit. Contudo até o momento só estudamos estas ressonâncias em um regime de densidade atômica de átomos de Rydberg em torno de 4×10^9 cm⁻³, ou seja, em uma armadilha magneto-óptica. Além do mais, tais amostras são tridimensionais, impossibilitando a observação de anisotropias espaciais nas interações entre dois átomos (2), as quais podem vir a ser interessantes para computação quântica. Neste projeto temos como objetivo estudar as interações entre átomos de Rydberg em sistemas unidimensionais e bidimensionais, e para isso aprisionaremos os átomos em uma armadilha de dipolo e em seguida em uma rede óptica. No dipolo os átomos estarão distribuídos em um cilindro e na rede os átomos estarão distribuídos em aproximadamente 30 planos com um raio de 30 a 40 micrometros e separados por 5 micrometros de distância . Tais distribuições espaciais nos permitirão observar anisotropias devido a interações elétricas, além da anisotropia dipolo-dipolo.

Palavras-chave: Armadilha magneto óptica. Armadilha de dipolo. Átomos de Rydberg.

Referências

1 CABRAL, J. S; KONDO, J. M.; GONÇALVES, L. F.; MARCASSA, L. G.; BOOTH, D.; TALLANT, J.; SHAFFER, J. P. Manipulation of quantum state transfer in cold Rydberg atom collisions. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 8, p. 093023-1-093023-17, 2010.

2 CARROLL, T. J; CLARINGBOULD, K; GOODSELL, A; LIM, M. J; NOEL, M. W. Angular dependence of the dipole-dipole interaction in a nearly one-dimensional sample of Rydberg atoms. **Physical Review Letters**, v. 93, n. 15, p. 153001, 2004.

PG-113A - Criticalidade auto-organizada em avalanches neurais

SANTAMARIA, Julian Andres Jaimes¹; MAIA, Leonardo Paulo¹

julian@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Criticalidade Auto-Organizada (SOC) é um termo introduzido por Bak, Tang e Wiesenfeld (BTW) em 1987 (1), com o objetivo de explicar a grande variedade de sistemas que apresentam invariância de escala na natureza. Este comportamento livre de escala (assumido no começo como sinal de criticalidade) seria o resultado de um mecanismo genérico comum presente em todos os sistemas dinâmicos com muitos graus de liberdade que interagem entre si. Há um crescente conjunto de evidências em Neurociência que vem se constituindo no que talvez seja o maior suporte empírico à SOC já observado. Diferentes experimentos (2, 3) com redes de eletrodos dispostos ao longo de fatias de tecido cortical têm revelado padrões de atividade espaço-temporal perfeitamente coerentes com o que seria esperado no contexto de SOC, que são distribuições do tipo lei de potência tanto para a duração temporal quanto para a extensão espacial das avalanches na rede de neurônios. No entanto, a ideia da SOC sempre despertou controvérsias em relação à sua verdadeira relevância na explicação dos fenômenos a que era aplicada. Recentemente, Bonachela e colaboradores (4) propuseram um formalismo que permite identificar a ausência de SOC no sentido estrito em sistemas fora do equilíbrio, nos quais não existe conservação da energia. Baseados neste formalismo, eles conseguiram provar que um modelo teórico de avalanches neurais proposto em 2007 por Levina, Herrmann e Geisel (LHG), não possui as propriedades necessárias para ser chamado de modelo do tipo SOC. O objetivo deste trabalho é tentar aplicar o formalismo proposto em (4) a outros modelos de avalanches neurais não conservativos propostos na literatura.

Palavras-chave: Criticalidade auto-organizada. Transições de fase. Redes neurais.

Referências

- 1 BAK, P.; TANG, C.; WEISENFELD, K. Self-organized criticality: an explanation of 1/f noise. **Physical Review Letters**, v. 59, n. 4, p. 381–384, Jan. 1987.
- 2 BEGGS, J. M.; PLENZ, D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. **Journal of Neuroscience**, v. 23, n. 35, p. 11167-11177, 2003.
- 3 BONACHELA J. A.; MUÑOZ M. A Self-organization without conservation: true or just apparent scale-invariance? **Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment**, p. 09009, 2009. DOI: 10.1088/1742-5468/2009/09/P09009.

PG-114A - Revisão do efeito da mídia no modelo de Axelrod

PERES, Lucas Vieira Guerreiro Rodrigues¹; FONTANARI, José Fernando¹

lucas.v.rodrigues@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Processo estocástico baseados em agentes, do inglês Agent-Based Models (ABM), é uma classe de algoritmos que simula interações entre indivíduos e seu meio ambiente, fornecendo uma alternativa elegante para o entendimento de problemas em matemática descritiva. Atualmente, ABMs fornecem resultados na previsão de formação de grupos, disseminação de doenças, comportamento social, etc. Temos como exemplo de ABMs o Modelo de Axelrod e a simulação da manutenção da diversidade cultural. Neste trabalho evisaremos o problema de inserirmos neste modelo um campo externo constante, interpretado como a mídia. Em termos da simulação, além da interação com sua vizinhança local, cada agente pode interagir com um vizinho fictício constante estabelecido previamente. É conhecido da literatura que esta adição aumenta a inhomogeneidade dos estados estacionários e a diversidade cultural da rede, indo contra o efeito esperado de um campo externo constante. Este efeito é facilmente entendido quando observarmos que a diversidade cultural aumenta quando aumentamos a intensidade do campo externo. Conclui-se que as interações locais trabalham no sentido de tornar os estados absorventes menos fragmentados em comparação com a situação em que os agentes interagem apenas com a mídia.

Palavras-chave: Modelos estocásticos. Modelo de Axelrod. Mecânica estatística.

Referências

- 1 AXELROD, R. The dissemination of culture. **Journal of Conflict Resolution**, v.41, n. 2, p. 203–226, April 1997.
- 2 SHIBANAI, Y.; YASUNO, S.; ISHIGURO, I. Effects of global information feed-back on diversity. **Journal of Conflict Resolution**, v. 45, n. 1, p. 80–96, Feb. 2001.
- 3 STAUFFER, D.; AHARONY, A. **Introduction to percolation theory**. 2nd. ed. New York: CRC Press, 1994.
- 4 CASTELLANO, C.; MARSILI, M.; VESPIGNANI, A. Nonequilibrium phase transition in a model for social influence. **Physical Review Letters**, v. 85, n. 16, p. 3536, Oct. 2000.

PG-115A - Amplificando os efeitos do movimento molecular em experimentos DIPSHIFT-like

COBO, Marcio Fernando¹; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹; ACHILLES, Anja²; REICHERT, Detlef²; SAALWAECHTER, Kay²

marciofcobo@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Institut für Physik - Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Neste trabalho propomos a implementação de uma técnica de Ressonância Magnética de Estado Sólido (RMN-ES) para o estudo de dinâmica molecular com taxas de movimento de centenas de Hertz a centenas de kHz, o chamado Regime de Dinâmica Intermediária. A técnica proposta baseia-se na técnica DIPSHIFT (correlação dipolar deslocamento químico) (1), a qual utiliza a interação dipolar magnética entre ¹³C e ¹H como sonda do movimento molecular. Porém para movimentos de pequena amplitude ou sistemas com fracos acoplamentos dipolares, as curvas obtidas com a técnica DIPSHIFT são pouco sensíveis a mudanças nas taxas de movimento, dificultando sua quantificação. Tendo em vista essa restrição, Hong e colaboradores (2) propuseram uma implementação (Time-Constant DIPSHIFT), a qual amplifica os efeitos do acoplamento dipolar nas curvas de DIPSHIFT e consequentemente os efeitos dos movimentos moleculares, tornando possível a análise de sistemas com acoplamentos dipolares fracos e/ou pequenas amplitudes de movimento. Porém, nessa implementação o sistema evolui sob a presença da interação dipolar C-H durante um tempo constante para todos os pontos experimentais da curva, de modo que os efeitos de perda de correlação devido aos movimentos moleculares (diminuição de T₂ induzida pelo movimento) desaparecem ao normalizar a curva. Como tais perdas de correlação são imprescindíveis para movimentos moleculares com taxas de centenas de Hz, propomos neste trabalho uma implementação da Técnica DIPSHIFT, que assim como a técnica Time-Constant DIPSHIFT, amplifica os efeitos da interação dipolar, porém sendo sensível a perda de correlação advinda dos movimentos moleculares. A fim de verificar a validade e eficiência dessa técnica, cálculos teóricos, simulações numéricas e experimentos em amostras padrão foram realizados, sob diversas condições experimentais, visando determinar quais os parâmetros ideais a serem usados de modo evitar artefatos que podem comprometer a correta análise dos resultados experimentais obtidos.

Palavras-chave: Ressonância magnética nuclear. Movimentos moleculares. DIPSHIFT.

Referências

- 1 MUNOWITZ, M. et al. Two-dimensional rotational spin-echo nuclear magnetic resonance in solids: correlation of chemical shift and dipolar interactions. **Journal of the American Chemical Society**, v. 103, n. 10, p. 2529-2533, 1981.
- 2 HONG, M. et al. Coupling amplification in 2D MAS NMR and its application to torsion angle determination in peptides. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 129, n. 1, p. 85-92, 1997.

PG-115B - Amplifying the effects of molecular motion in DIPSHIFT-like experiments

COBO, Marcio Fernando¹; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹; ACHILLES, Anja²; REICHERT, Detlef²; SAALWAECHTER, Kay²

marciofcobo@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Institut für Physik - Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Dipolar Chemical Shift Correlation (DIPSHIFT) (1) is frequently used to study molecular motions by probing the reorientations through the modulation introduced in the dipolar CH coupling and T2 (2). In systems where the coupling is weak or the reorientation angle is small, a variant of the DIPSHIFT experiment, where the effective dipolar coupling is amplified by a REDOR pi - pulses train, is applied. However, the previously described experiment is not sensitive to the T2 modulation introduced by the motion (3), which avoid the observation of motions with rates ranging from hundreds of Hz to few kHz. We present a DIPSHIFT implementation which amplifies the dipolar couplings and is sensitive to T2 effects. Spin dynamics simulations, analytical calculations and experiments demonstrate the sensitivity of the technique to molecular motions and the best experimental conditions to avoid imperfections. Furthermore, an in-depth analysis of the DIPSHIFT experiments was done, which allowed explaining the physical origin of many artifacts found in the literature data. We also show that in DIPSHIFT-like experiments, simple Lee-Goldburg homonuclear decoupling may perform as good as, or even better than, its more intricate variants, such as Frequency Switched and Phase Modulated Lee-Goldburg. To demonstrate the use of the technique, we show recent applications to membrane lipids.

Keywords: Nuclear magnetic resonance. Molecular motions. DIPSHIFT.

Referências

1 MUNOWITZ, M. et al. Two-dimensional rotational spin-echo nuclear magnetic resonance in solids: correlation of chemical shift and dipolar interactions. **Journal of the American Chemical Society**, v. 103, n. 10, p. 2529-2533, 1981.

2 HONG, M. et al Coupling amplification in 2D MAS NMR and its application to torsion angle determination in peptides. **Journal of Magnetic Resonance**, v. 129, n. 1, p. 85-92, 1997.

PG-116A - Ressonância de spin induzida por Zitterbewegung em fios quânticos

HACHIYA, Marco O.¹; USAJ, Gonzalo²; EGUES, J. Carlos¹

marco_hachiya@yahoo.com.br;

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto Balseiro and Centro Atómico Bariloche, - Comisión Nacional de Energía Atómica

Recentemente, o Zitterbewegung em fios quânticos foi proposto teoricamente por Schliemann et al. (1). Este efeito é caracterizado por um movimento oscilatório na posição e nas componentes de spin de uma pacote de ondas eletrônico injetado ao longo de um fio quântico com interação spin-órbita. Investigaremos o Zitterbewegung calculando o valor esperado dependente do tempo para os operadores de spin. Neste trabalho, consideramos o Zitterbewegung num fio quântico com muitas subbandas levando em conta as interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus. Encontramos que um campo magnético externo perpendicular ao fio quântico pode ser usado para alterar a probabilidade de spin-flip, i.e., a condição de ressonância. Mostraremos que a comparação entre o confinamento harmônico e poço quadrado apresenta características físicas distintas. O confinamento poço quadrado apresenta múltiplas condições de ressonância em contraste com o confinamento harmônico que apresenta somente uma. Um possível cenário experimental para a observação desse efeito é proposto usando injeção por meio de um ponto de contato quântico (2). Similaridades entre a ressonância de spin induzida por Zitterbewegung e o fenômeno "ressonância de spin balística" (3) são também discutidas. Este trabalho é financiado pelo programa CIAM (NSERC-CNPq-CONICET) e FAPESP.

Palavras-chave: Fios quânticos. Zitterbewegung. Intereração spin-órbita.

Referências

- 1 SCHLIEmann, J.; LOSS, D.; WESTERVELT, R. M. Zitterbewegung of electronic wave packets in III-V zinc-blende semiconductor quantum wells. **Physical Review Letters**, v. 94, n. 20, p. 206801, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.206801.
- 2 TOPINKA, M. A. et al. Imaging coherent electron flow from a quantum point contact. **Science**, v. 289, n. 5488, p. 2323-26, 2000. DOI: 10.1126/science.289.5488.2323.
- 3 FROLOV, S. M. et al. Ballistic spin resonance. **Nature**, v. 458, p. 868-879, 2009. DOI:10.1038/nature07873.

PG-117A - Vórtices e turbulência em condensados de Bose-Einstein

CARACANHAS, M. A.¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

caracanhas@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A recente observação de vórtices e do regime turbulento em nossa amostra condensada, perturbada através um campo magnético oscilatório, nos levou ao estudo da turbulência em condensados atômicos (1). Nós explicamos a expansão anômala da nuvem turbulenta baseados em um tratamento hidrodinâmico. Nesse projeto está sendo analisado também o comportamento de um sistema com vórtices e turbulência envolvendo duas espécies condensadas. O grupo de efeitos advindos desses estudos nos trará novas idéias para realizações experimentais, as quais poderão testar os vários aspectos da teoria, como o decaimento da turbulência quântica.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Vórtices. Turbulência.

Referências

1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M.; CASTILHO, P.; OLIMPIO, E. P.; ROATI, G.; MAGALHAES, D. V.; MAGALHAES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618-043622, 2009.

PG-117B - Vortices and turbulence in Bose-Einstein condensates

CARACANHAS, M. A.¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

caracanhas@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

The recent experimental observation of vortices and the turbulent regime in our Bose-Einstein condensate after the application of an external oscillatory perturbation led us to study the quantum turbulence in condensates (1). We explained the anomalous expansion of the turbulent cloud basing on a hydrodynamic treatment. In this project we are analyzing also the behavior of a system with vortices and turbulence involving a mixture of two different species of condensates. The group of answers found in these studies will provide new experimental ideas to the investigation of a variety of conditions, including the decayment of the quantum turbulence.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Vortex. Turbulence.

References

- 1 HENN, E. A. L.; SEMAN, J. A.; RAMOS, E. R. F.; CARACANHAS, M.; CASTILHO, P.; OLIMPIO, E. P.; ROATI, G.; MAGALHAES, D. V.; MAGALHAES, K. M. F.; BAGNATO, V. S. Observation of vortex formation in an oscillating trapped Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, v. 79, n. 4, p. 043618-043622, 2009.

PG-118A – Processo de nanopartículas de Au induzida por pulsos laser de femtossegundos formatados

FERREIRA, Paulo Henrique Dias¹; SIQUEIRA, Jonathas de Paula¹; VIVAS, Marcelo Gonçalves¹; BONI, Leonardo de¹; MISOGUTI, Lino¹; MENDONÇA, Cleber Renato¹
paulohdf@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nas últimas décadas, processos de ionização devido a campos laser fortes levaram a avanços na física experimental e teórica. Por outro lado, nanopartículas metálicas têm aparecido como uma importante classe de materiais ópticos, devido à sua grande variedade de aplicações, tais como sensores, atividade catalítica, optoeletrônica e dispositivos eletrônicos. Neste trabalho foi estudado a influência de diferentes máscaras de fase espectrais e energias de pulso sobre a ionização da quitosana, a fim de reduzir os íons de ouro. Como fonte de excitação, nós utilizamos pulsos de femtossegundos de um amplificador múltipla passagem criogênico, semeado por um oscilador de Ti:Safira (15 fs, 5 nJ, 790 nm, 86 MHz). Os pulsos de saída (30 fs, 790 nm, 2 mJ, 1 KHz) pode atingir intensidades até 10^{18} W/m². O sistema de formatação do pulso é composto por um modulador espacial de luz (Liquid Crystal - Spatial Light Modulator --LC-SLM). Através de um controle ativo do LC-SLM, somos capazes de manipular a fase de cada componente espectral do pulso. Para observar a dinâmica da formação de nanopartículas de ouro, nós monitoramos a banda de absorção do plasmon usando um sistema de aquisição com um espectrômetro. Observamos diferentes dinâmicas de formação e também um mínimo de intensidade necessária para ionizar a quitosana, visualizado através da banda de plasmon das nanopartículas. Os perfis temporais e espectrais (de fase e amplitude) dos pulsos formatados foram caracterizados através da técnica FROG (Frequency-Resolved Optical Gating). Com esta técnica, nós estudamos a influência de pulsos de femtossegundos formatados espectralmente na fotoredução de nanopartículas de ouro.

Palavras-chave: Ionização. Nanopartículas de ouro. Pulsos de femtossegundos.

Referências:

- 1 BHAWALKAR, J. D.; HE, G. S.; PRASAD, P. N. Nonlinear multiphoton processes in organic and polymeric materials. **Reports on Progress in Physics**, v. 59, n. 9, p. 1041-1070, 1996.
- 2 VADIM, V. L. et al. Multiphoton intrapulse interference. II. Control of two- and three-photon laser induced fluorescence with shaped pulses. **The Journal of Chemical Physics**, v. 118, n. 7, p. 3187-3196, 2003.

PG-119A - Interação spin-órbita em poços quânticos com estrutura wurtzita

PENTEADO, Poliana H.¹; FU, Jiyong¹; BERNARDES, Esmerindo¹; EGUES, J. Carlos¹
poliana@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Neste trabalho investigamos a interação spin-órbita para elétrons em um poço quântico com duas sub-bandas na fase wurtzita. A partir do modelo de Kane 8x8, derivamos um Hamiltoniano efetivo 2x2 que descreve os elétrons de condução. A dedução desse Hamiltoniano efetivo inclui a interação entre os orbitais s e pz (1-3), ausente em estruturas do tipo zincblende, e a renormalização da função de onda correspondente à banda de condução, ingrediente essencial para a correta obtenção do acoplamento spin-órbita. Como resultado, encontramos (i) o termo de Rashba usual, proveniente da assimetria de inversão estrutural do poço quântico (confinamento), (ii) um termo similar ao de Rashba originário, no entanto, da assimetria de inversão do cristal (termo ausente em cristais do tipo zincblende) e (iii) uma nova contribuição do tipo Rashba proporcional ao perfil do potencial estrutural, resultante da inclusão da interação spz. Ao contrário de heteroestruturas zincblende, esse último termo é não nulo mesmo em estruturas simétricas com uma sub-banda (4, 5). A determinação dos parâmetros do acoplamento spin-órbita é feita através de um cálculo autoconsistente. Quando uma voltagem é aplicada ao material, observamos que o novo termo de Rashba mostra uma dependência distinta com a tensão quando comparado ao termo usual de Rashba. Como consequência, o acoplamento intersub-banda também se mostra sensível ao potencial externo. Por completeza incluímos também a contribuição vinda do termo de Dresselhaus. Este projeto é financiado pelas agências de fomento FAPESP, CNPq e CAPES.

Palavras-chave: Interação spin-órbita. Poços quânticos. Wurtzita.

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 LEW YAN VOON, L. C.; WILLATZEN, M.; CARDONA, M. Terms linear in k in the band structure of wurtzite-type semiconductors. **Physical Review B**, v. 53, n. 16, p. 10703-10714, 1996.
- 3 FU, J. Y.; WU, M. W. Spin-orbit coupling in bulk ZnO and GaN. **Journal of Applied Physics**, v. 104, n. 9, p. 093712-1- 093712-7, 2008.
- 4 CALSAVERINI, R. S.; BERNARDES, E.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. **Physical Review B**, v. 78, n. 15, p. 155313-1-1553-16, 2008.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

5 BERNARDES, E.; SCHLIEmann, J.; LEE, M.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 7, p. 076603-1-076603-4, 2007.

PG-119B - Spin-orbit coupling in InAs-based wurtzite quantum wells

PENTEADO, Poliana H.¹; FU, Jiyong¹; BERNARDES, Esmerindo¹; EGUES, J. Carlos¹
poliana@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

We investigate the spin-orbit coupling for electrons in wurtzite quantum wells with two subbands. By folding down the 8×8 Kane model, accounting for the s-pz orbital mixing (1-3) absent in zincblende structures, we derive an effective 2×2 Hamiltonian for the conduction electrons. In this derivation we consider the renormalization of the spinor component of the conduction band wave function, which is crucial to properly obtain the corresponding spin-orbit couplings. In addition to the Rashba-type term arising from the bulk inversion asymmetry of the wurtzite lattice, we obtain the usual linear in momentum Rashba term induced by the structural inversion asymmetry of the well. Interestingly, we also find a new Rashba-like contribution, proportional to the well profile only and not to its derivative, entirely arising from the s-pz mixing. In contrast to zincblende semiconductor wells, here this term is non-zero even in symmetric structures with one subband (4, 5). The spin-orbit coupling parameters are obtained via a self-consistent calculation. By gating the structures, which breaks the structural symmetry of the wells, we find that the new Rashba term shows a distinctive voltage dependence as compared to that of the usual Rashba coupling; as a consequence, the intersubband spin-orbit interaction in a single well is also sensitive to the external gate. For completeness, the Dresselhaus term is also included in our calculation.

Keywords: Spin-orbit interaction. Quantum wells. Wurtzite.

References

- 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 LEW YAN VOON, L. C.; WILLATZEN, M.; CARDONA, M. Terms linear in k in the band structure of wurtzite-type semiconductors. **Physical Review B**, v. 53, n. 16, p. 10703-10714, 1996.
- 3 FU, J. Y.; WU, M. W. Spin-orbit coupling in bulk ZnO and GaN. **Journal of Applied Physics**, v. 104, n. 9, p. 093712-1-093712-7, 2008.
- 4 CALSAVERINI, R. S.; BERNARDES, E.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. **Physical Review B**, v. 78, n. 15, p. 155313-1-1553-16, 2008.
- 5 BERNARDES, E.; SCHLIEMANN, J.; LEE, M.; EGUES, J. C.; LOSS, D. Spin-orbit interaction in symmetric wells with two subbands. **Physical Review Letters**, v. 99, n. 7, p. 076603-1-076603-4, 2007.

PG-120A - Estudo da absorção de dois fótons em colisões frias

PAIVA, Rafael Rothganger de¹; PEÑAFIEL, Edwin Pedrozo¹; VIVANCO, Franklin Adán Julca¹; MAGALHAES, Kilvia Mayre Farias¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

rothganger@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O processo de absorção de dois fótons pode ocorrer de forma linear ou de forma não linear. Neste trabalho utilizamos esses dois tipos para entender e manipular o processo de colisões frias. Nossa sistema de interesse consiste de uma amostra de átomos de sódio aprisionados em uma armadilha magneto óptica, esta armadilha é carregada com vapor de sódio que sai de um forno e é desacelerado por um desacelerador Zeeman. No estudo do processo não linear de absorção cooperativa de dois fótons por um par de átomos de sódio (1) incidimos um feixe para fazer essa excitação na nossa amostra. A frequência da excitação tem energia que é igual a metade da energia suficiente para a transição do par do estado fundamental para o estado duplamente excitado, assim o efeito de cooperação entre o par vai distribuir a energia dos dois fótons que são absorvidos para promover os átomos para o estado duplamente excitado. Apesar deste processo ter uma secção de choque pequena $\approx 10^{-21} \text{ cm}^2$ obtivemos alguns indícios que este processo pode ser observado no regime de baixa intensidades ($\approx 1.59 \text{ W/cm}^2$) e de densidades da ordem de $10^{12} \text{ átomos/cm}^3$. Na outra parte deste trabalho vamos utilizar o processo de absorção de dois fótons de uma forma linear para induzir um potencial molecular e desta forma ligar dois átomos. Duas frequências vão ser incididas na amostra, uma para o vermelho ligando o estado fundamental com a parte atrativa do primeiro estado excitado e outra azul, ligando o estado fundamental com a parte repulsiva do primeiro estado excitado. Na presença destas frequências o par de átomos de sódio vai estar confinado em um potencial potencial ligante, criando assim uma molécula fotônica. Um estudo teórico do formato e os níveis de energia desse potencial já foram feitos pelo nosso colaborador Yehuda B. Band e também será apresentado neste trabalho.

Palavras-chave: Armadilha magneto optica. Colisões frias. Absorção de dois fótons.

Referências

1 PEDROZO, E. **Absorção cooperativa de dois fótons em átomos frios.** 2011.84 p. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

PG-121A - Transição para turbulência quântica em superfluidos finitos

SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo¹; TELLES, Gustavo¹; YUKALOV, Vyacheslav²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

rfshiozaki@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Bogolubov Laboratory of Theoretical Physics - Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

Apresentamos um novo conceito em turbulência quântica: o efeito do tamanho finito para bôsons aprisionados. Num condensado de Bose-Einstein de átomos de ^{87}Rb , observamos o aparecimento deste fenômeno o qual é caracterizado pela formação de configurações emaranhadas de vórtices. Descrevemos a transição para este estado em termos da amplitude e da duração de um campo externo oscilante responsável pela formação dos vórtices. Embora a transição de um estado não turbulento para um turbulento aconteça de forma gradual, foi possível determinar uma linha crítica entre os dois regimes. Um modelo simplificado foi elaborado para qualitativamente explicar os dados experimentais. Num superfluido cujo tamanho finito desempenha um importante papel, o entendimento da turbulência quântica pode revelar importantes aspectos associados com o fenômeno de turbulência em fluidos em geral. Este trabalho foi publicado no periódico *Laser Physics Letters* (1).

Palavras-chave: Turbulência quântica. Condensado de Bose-Einstein. Vórtices quânticos.

Referências

- 1 SHIOZAKI, R. F.; TELLES, G. D.; YUKALOV, V. I.; BAGNATO, V. S. Transition to quantum turbulence in finite size superfluids. *Laser Physics Letters*, v. 8, n. 5, p. 393–397, 2011.

PG-121B - Transition to quantum turbulence in finite size superfluids

SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo¹; TELLES, Gustavo¹; YUKALOV, Vyacheslav²; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

rfshiozaki@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Bogolubov Laboratory of Theoretical Physics - Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

A novel concept of quantum turbulence in finite size superfluids, such as trapped bosonic atoms, is discussed. We have used an atomic ^{87}Rb Bose-Einstein condensate (BEC) to study the emergence of this phenomenon. In our experiment, the transition to the quantum turbulent regime is characterized by a tangled vortex lines formation, controlled by the amplitude and time duration of the excitation produced by an external oscillating field. The transition from the non-turbulent to the turbulent regime is a rather gradual crossover. But it takes place in a sharp enough way, allowing for the definition of an effective critical line separating the regimes. A simple model is suggested to account for the experimental observations. Quantum turbulence emerging in a finite-size superfluid may be a new idea helpful for revealing important features associated to turbulence, a more general and broad phenomenon. The whole analysis has been published in *Laser Physics Letters* (1).

Keywords: Quantum turbulence. Bose-Einstein condensation. Quantum vortices.

References

- 1 SHIOZAKI, R. F.; TELLES, G. D.; YUKALOV, V. I.; BAGNATO, V. S. Transition to quantum turbulence in finite size superfluids. *Laser Physics Letters*, v. 8, n. 5, p. 393–397, 2011.

PG-122A - Métodos alternativos para obtenção de meios ativos para lasers de corante em estado sólido

QUEIROZ, Thiago B. de¹; BOTELHO, Moema de Barros e Silva¹; ECKERT, Hellmut²; BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo A.¹

branquinho@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Westfälische Wilhelms-Universität Münster - Institut für Physikalische Chemie

Várias aplicações podem ser encontradas para materiais sólidos luminescentes baseados em corantes orgânicos, tais como na fabricação de dispositivos iluminadores como LED's , para experimentos de transferência de energia e para sensores biológicos . Embora o corante Rodamina 6G (Rh6G) seja um centro luminescente interessante devido a sua grande secção de choque de absorção e alta eficiência quântica, a preparação de um material em estado sólido contendo boas propriedades térmicas, mecânicas e ópticas ainda têm-se mostrado ser um desafio experimental. Uma das dificuldades a ser contornada é a necessidade de controlar ou limitar a formação de agregados, que influenciam as propriedades ópticas da Rh6G. Para promover uma melhor dispersão da Rh6G em materiais sólidos, matrizes inorgânicas mesoporosas foram preparadas através da metodologia sol-gel com sítios ativos que atraem a molécula de Rh6G por interações do tipo π - π ou σ - π ou eletrostaticamente. A incorporação nas matrizes sólidas confere maior estabilidade à espécie luminescente e resulta em uma plataforma mais flexível para aplicações. Neste sentido, materiais luminescentes foram preparados por impregnação úmida de duas classes de matrizes (a) xerogéis de silicato e de fenil-silicatos e; b) vidros mesoporosos sódio-alumino-silicato nas razões Si/Al = 6/1 e 9/1), com soluções de diferentes concentrações de Rh6G. A matriz modificada com grupos aromáticos permitiu a preparação de materiais luminescentes baseados em interações do tipo π - π ou σ - π entre matriz e corante orgânico. As amostras obtidas a partir dos vidros sódio-alumínio-silicato fazem uso da interação eletrostática entre o sítio aniónico do vidro (AlO_4^-) e a Rh6G. A estrutura das matrizes foi verificada por técnicas de RMN de estado sólido em alta resolução. Estudos fotofísicos comprovam significante influência de agregação do corante com o aumento da concentração, para todas as amostras. Alguns indicativos neste caso são os curtos tempos de vida de estado excitado, (em torno de 2 ns) e baixo rendimento quântico de luminescência (até 20%) observados para as matrizes sódio-alumino-silicato incorporadas em maiores concentrações. Este processo pode ser associado à intensa tendência de adsorção do corante na matriz guiado pela troca iônica. Em contraste, tempos de vida longos (em torno de 6 ns) e altos rendimentos quânticos (até 76%) foram observados nas matrizes silicato fenil-modificadas. Essas características podem ser associadas a formação preferencial de agregados luminescentes tipo J nesses sistemas. Finalmente, verificou-se que as matrizes sódio-alumino-silicato apresentam uma incorporação irreversível das moléculas de corante, o que é um resultado favorável para aplicações em meios biológicos

Palavras-chave: Sol-gel. Organosilicato. Sodio-alumino-silicato. Rodamina 6G.

PG-122B - Alternative methods to prepare Rh6G laser dye solid state materials based on ion exchange process or π - π stacking

QUEIROZ, Thiago B. de¹; BOTELHO, Moema de Barros e Silva¹; ECKERT, Hellmut²; BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo A.¹

branquinho@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Westfälische Wilhelms-Universität Münster - Institut für Physikalische Chemie

Two classes of solid state fluorescent materials with different amounts of Rhodamine 6G (Rh6G) laser dye were prepared by wet impregnation: a silicate/organosilicate xerogel and a sodium aluminosilicate mesoporous glass. The first class was obtained as pure inorganic silicate and phenyl modified silicate, using an ionic liquid (IL) as catalytic agent on the sol-gel process and as mesoporous former (labeled IL-SiO₂ and IL-SiO₂:Ph). The second was prepared at different ratios Si/Al (6/1 and 9/1). The phenyl modified silicate matrix allowed us to prepare Rh6G luminescent materials based on π - π guest-host interaction while the sodium aluminosilicate glasses, with an exchangeable cation (Na⁺), could be prepared based on the (AlO₄)⁻ ionic site and Rh6G⁺ cation electrostatic interaction. Luminescent studies as function of Rh6G concentration show significant influence of dye aggregation in all the series of samples. Relative short excited state lifetime (about 2 ns) and low quantum yield features show that aggregation effects are found to be strongly pronounced on the sodium aluminosilicate matrices. This might be attributed to high Rh6G loading ratios, driven by the ion exchange process. Oppositely, longer lifetime (up to 6.0 ns) and high quantum yield (up to 76%) on the phenyl modified silicate sample lead to that π - π interaction between the dye molecules and the phenyl sites, as well as geometric factors, seem to contribute to the dye dispersion or to the preferential formation of fluorescent J-dimer. In addition, the sodium aluminosilicate samples show irreversible Rh6G loading under releasing conditions.

Palavras-chave: Sol-gel. Organosilicate. Sodium-aluminium-silicate. Rhodamine 6G

PG-123A – Modelo de Kinouchi-Copelli como um processo de ramificação: criticalidade e emergência de avalanches

MOSQUEIRO, Thiago S.¹; MAIA, Leonardo P.¹; AKIMUSHKIN, Camilo¹

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Bursts de atividade em redes neurais escondem a linguagem misteriosa através da qual os neurônios podem comunicar sensações e responder a estímulos externos. Diversos experimentos, tanto *in vitro* como *in vivo*, exibem distribuições com cauda longa para duas grandezas (1,2): (i) duração destes bursts e (ii) número de neurônios que contribuíram para o sinal (tamanho do burst). Bursts com distribuições de leis de potência são usualmente chamados de avalanches. Nesse estudo, propomos um formalismo de processo de ramificação para analisar o comportamento de bursts de atividade neural usando o modelo de Kinouchi-Copelli (KC), originalmente concebido para explicar questões ligadas a sistemas sensoriais (3). Nós mostramos que no modelo KC avalanches emergem no ponto crítico originalmente identificado no estudo de processamento de informação. Especificamente, nós calculamos as probabilidades para extinção de bursts e as distribuições de duração/tamanho de avalanches para diversas redes complexas (Bethe, Erdős-Rényi, exponencial e lei de potência). Nossos resultados são comparados com simulações. Os expoentes das leis de potência estão de fato em acordo com observações experimentais em sistemas biológicos reais. Esperamos que nossos resultados possam contribuir para o debate com relação à relevância do conceito de criticalidade em redes neurais.

Palavras-chave: Neurodinâmica. Kinouchi-Copelli. Processo de ramificação.

Referências:

1 BEGGS, J.; PLENZ, D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. **The Journal of Neuroscience**, v. 23, n. 36, p. 11167-11177, 2003.

2 MAZZONI, A. et al. On the dynamics of the spontaneous activity in neuronal networks. **PLoS ONE**, v. 2, n. 5, p. e439-1-e439-12, 2007.

3 KINOUCHI, O.; COPELLI, M. Optimal dynamic range of excitable networks at criticality. **Nature Physics**, v. 2, p. 348-352, 2006.

PG-123B – Kinouchi-Copelli model as branching process: criticality and emergence of avalanches

MOSQUEIRO, Thiago S.¹; MAIA, Leonardo P.¹; AKIMUSHKIN, Camilo¹

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Bursts de atividade em redes neurais escondem a linguagem misteriosa através da qual os neurônios podem comunicar sensações e responder a estímulos externos. Diversos experimentos, tanto in vitro como in vivo, exibem distribuições com cauda longa para duas grandezas (1,2): (i) duração destes bursts e (ii) número de neurônios que contribuíram para o sinal (tamanho do burst). Bursts com distribuições de leis de potência são usualmente chamados de avalanches. Nesse estudo, propomos um formalismo de processo de ramificação para analisar o comportamento de bursts de atividade neural usando o modelo de Kinouchi-Copelli (KC), originalmente concebido para explicar questões ligadas a sistemas sensoriais (3). Nós mostramos que no modelo KC avalanches emergem no ponto crítico originalmente identificado no estudo de processamento de informação. Especificamente, nós calculamos as probabilidades para extinção de bursts e as distribuições de duração/tamanho de avalanches para diversas redes complexas (Bethe, Erdős-Rényi, exponencial e lei de potência). Nossos resultados são comparados com simulações. Os expoentes das leis de potência estão de fato em acordo com observações experimentais em sistemas biológicos reais. Esperamos que nossos resultados possam contribuir para o debate com relação à relevância do conceito de criticalidade em redes neurais.

Keywords: Neurodynamics. Kinouchi-Copelli. Branching Process.

References:

1 BEGGS, J.; PLENZ, D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. **The Journal of Neuroscience**, v. 23, n. 36, p. 11167-11177, 2003.

2 MAZZONI, A. et al. On the dynamics of the spontaneous activity in neuronal networks. **PLoS ONE**, v. 2, n. 5, p. e439-1-e439-12, 2007.

3 KINOUCHI, O.; COPELLI, M. Optimal dynamic range of excitable networks at criticality. **Nature Physics**, v. 2, p. 348-352, 2006.

PG-124A - Caracterização de microestruturas fabricadas via polimerização por dois fótons usando microscopia CARS

TRIBUZI, Vinicius¹; BALDACCHINI, Tommaso²; ZADOYAN, Ruben²; MENDONÇA, Cleber Renato¹

tribuzi@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Technology and Applications Center - Newport Corporation

Neste trabalho usamos a microscopia por espalhamento Raman anti-stokes coerente (CARS – Coherent Anti-stokes Raman Scattering) para estudar o encolhimento sofrido por diferentes resinas acrílicas quando estas são polimerizadas por absorção de dois fótons – técnica usada para a fabricação de microestruturas. O sinal CARS é produzido quando dois feixes, chamados de feixe de bobeio e feixe Stokes, incidem sobre a amostra de forma que a diferença de frequência $\omega_p - \omega_s$ coincida com a frequência de vibração de algum tipo de ligação química na molécula irradiada. Usando a microscopia CARS é possível obter imagens com seletividade química sem a necessidade de um dopante fluorescente. A microscopia CARS produz um sinal de maior intensidade que a microscopia Raman convencional por se tratar de uma emissão estimulada. Além disso, esse processo possui alta penetrabilidade óptica por usar laser com comprimento de onda na região do infravermelho próximo. Para aplicar esta técnica usamos um laser pulsado focalizado através de uma objetiva de microscópio. Por ser um processo de óptica não-linear esse fenômeno apenas ocorrerá em uma região em torno do volume focal da objetiva, onde a intensidade é maior. A amplitude do sinal CARS depende do numero de ligações químicas (osciladores) que estão sendo excitadas. Usando uma objetiva com abertura numérica conhecida sabemos que volume focal será sempre o mesmo e, portanto o sinal será proporcional à densidade de osciladores (numero de osciladores por unidade de volume irradiado). Assim, ajustando os feixes de forma a excitar a vibração da ligação C-H, podemos usar esta técnica como uma forma de comparar a densidade do polímero em relação à densidade da resina não polimerizada. Imagens de microestruturas polimerizadas por dois fótons foram obtidas com bom contraste mesmo quando as microestruturas ainda estavam imersas na resina não polimerizada. Apesar disso, não foi possível verificar uma grande diferença entre as taxas de encolhimento das diferentes composições de resinas usadas para fabricar as microestruturas.

Palavras-chave: Polimerização por dois fótons. Microestruturas. Microscopia

Referências

- 1 BALDACCHINI, T.; ZADOYAN, R. In situ and real time monitoring of two-photon polymerization using broadband coherent anti-Stokes Raman scattering microscopy. **Optics Express**, v. 18, n. 18, p. 19219-19231, 2010.
- 2 BALDACCHINI, T et al. Characterization of microstructures fabricated by two-photon

polymerization using coherent anti-stokes Raman scattering microscopy. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 113, n. 8, p. 12663-12668, 2009.

3 CHENG, J. X.; SUNNEY XIE, X. Coherent anti-stokes Raman scattering microscopy: instrumentation, theory, and applications. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 108, n. 3, p. 827-840, 2004.

PG-125A – Despertando a energia do vácuo

LIMA, W. C. C.¹; VANZELLA, D. A.T.¹

william@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

É fato sabido que, de todas as interações fundamentais da Natureza que conhecemos, a gravitacional é a que acopla mais fracamente. Isto nos leva a concluir rapidamente que na maior parte dos processos físicos, a força gravitacional desempenha papel diminuto. Na Teoria Quântica de Campos é atribuído ao estado de vácuo uma rica estrutura, a qual é indispensável para uma descrição consistente da Natureza. Entretanto, implicações experimentais diretas desta estrutura são muito sutis e requerem sistemas cuidadosamente projetados para serem observadas, como é o caso do efeito Casimir. A luz dos fatos mencionados acima, é de se esperar que na “fusão” minimamente consistente entre Gravitação e Mecânica Quântica, a chamada Teoria Quântica de Campos em Espaços-tempo Curvos (TQCEC), efeitos relacionados a perturbação do vácuo pelo campo gravitacional sejam muito difíceis de serem observados. De fato, a despeito de sua importância conceitual, o efeito de evaporação de buracos negros é praticamente impossível de ser observado para sistemas astrofísicos. Nossos resultados, todavia, mostram que no contexto da TQCEC é possível existir situações em que a evolução bem comportada do espaço-tempo força a densidade de energia de vácuo a tornar-se dominante sobre qualquer densidade de energia clássica (1, 2). Em particular, serão exibidos resultados onde a formação de uma estrela é responsável pelo mecanismo que “desperta” a energia de vácuo.

Palavras-chave: Teoria quântica de campos. Gravitação. Vácuo.

Referências

- 1 LIMA, W. C. C.; VANZELLA, D. A. T. Gravity-induced vacuum dominance. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 16, p. 161102, 2010.
- 2 LIMA, W. C. C.; MATSAS, G. E. A.; VANZELLA, D. A. T. Awaking the vacuum in relativistic stars. **Physical Review Letters**, v. 105, n. 15, p. 151102, 2010.

PG-125B - Awaking the vacuum energy

LIMA, W. C. C.¹; VANZELLA, D. A.T.¹

william@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

It has been widely believed that, except in very extreme situations, the influence of gravity on quantum fields should amount to just small, sub-dominant contributions. This view seemed to be endorsed by the seminal results obtained over the last decades in the context of renormalization of quantum fields in curved spacetimes. Here, however, we argue that this belief is false by showing that there exist well-behaved spacetime evolutions where the vacuum energy density of free quantum fields is forced, by the very same background spacetime, to become dominant over any classical energy-density component (1, 2). This semiclassical gravity effect finds its roots in the infrared behavior of fields on curved spacetimes. By estimating the time scale for the vacuum energy density to become dominant, and therefore for backreaction on the background spacetime to become important, we argue that this vacuum dominance may bear unexpected astrophysical and cosmological implications.

Keywords: Quantum field theory. Gravitation. Vacuum.

References

- 1 LIMA, W. C. C.; VANZELLA, D. A. T. Gravity-induced vacuum dominance. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 16, p. 161102, 2010.
- 2 LIMA, W. C. C.; MATSAS, G. E. A.; VANZELLA, D. A. T. Awaking the vacuum in relativistic stars. **Physical Review Letters**, v. 105, n. 15, p. 151102, 2010.

PG-126A - Propriedades estruturais e fotoluminescentes de pós do sistema YAG-SiO₂: Er obtidos pelo método dos precursores poliméricos

MENDES, Alessandra Carla¹; HERNANDES, Antonio Carlos¹; MAIA, Lauro June Queiroz²; CARVALHO, Jesiel Freitas²; LI, Máximo Siu¹
alecarlausp@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Física - Universidade Federal de Goiás

Y₃Al₅O₁₂ (YAG), YAlO₃ (YAP) e Y₄Al₂O₉ (YAM) correspondem às diferentes fases do sistema Y₂O₃-Al₂O₃. Quando dopadas com íons de Er³⁺ (emissão em 1540 nm), exibem potencial aplicação em amplificação óptica e guias de onda. Em compostos de Er³⁺:ítrio-aluminosilicatos, a adição de SiO₂ tem mostrado um aumento da solubilidade e dispersão dos íons de Er³⁺ nestas matrizes (1). Pós com (100-x) Y₃Al₅O₁₂ – (x) SiO₂ (x = 0, 10, 30 e 50 % em mol) dopados com 1% em mol de Er³⁺ foram sintetizados via método Pechini com o intuito de avaliar o papel da sílica na estrutura da matriz hospedeira e a influência desta nas propriedades ópticas dos íons de Er³⁺. Nitratos de alumínio, ítrio e érbio foram usados como precursores dos íons metálicos e tetraetiltritosilicato (TEOS) pré-hidrolizado foi usado para dispersar as nanopartículas. Amostras pré-tratadas a 400 oC foram submetidas a tratamentos térmicos na faixa de 700 – 1000 oC. A intensidade da fotoluminescência (FL) em 1540 nm foi investigada à temperatura ambiente com excitação a 980 nm de um laser de diodo. Com o objetivo de avaliar a influência da estrutura cristalina nas propriedades de FL, as fases de cada composição em função da temperatura de calcinação foram determinadas por difração de raio-x (DRX). Em conjunto com os resultados encontrados pela caracterização óptica e estrutural, concluímos que a presença de sílica favorece a emissão em 1540 nm devido à formação de fases secundárias (e também não-cristalinas) que aumentam a dispersão dos íons de Er³⁺. Tal efeito é mais evidente quando o solvente utilizado é o etanol. Encontrada a composição com maior emissão em 1540 nm (50% de SiO₂ tratada a 900 oC), filmes finos estão sendo preparados e prometem ser promissores no desenvolvimento de guias de onda amplificadores.

Palavras-chave: Aluminosilicatos de ítrio. Fotoluminescência. Método pechini.

Referências

- 1 CHEN, S.; TING, C.; LI, C. Flourescence enhancement and structural development of sol-gel derived Er³⁺-doped SiO₂ by yttrium codoping. **Journal of Materials Chemistry**, v. 71, n. 12, p. 1118-1123, 2002.

PG-127A - Estudo de transistores de efeito de campo orgânicos do tipo-p para aplicação em eletrônica flexível

MACIEL, Alexandre de Castro¹; FARIA, Roberto Mendonça¹

acmaciel@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho apresenta quatro tipos diferentes de transistores de efeito de campo orgânicos (OFET) baseados em politiofenos e semicondutores derivados do pentaceno. Além de substratos de silício e vidro, utilizamos substratos plásticos como acetato de celulose e papel na intenção de caracterizar OFETs para futura aplicação em eletrônica flexível. Estudamos a estabilização termo-mecânica de dispositivos a base de semicondutores semicristalinos TMTES-pentaceno e dielétrico de SiO₂ (1). PMMA, SU-8 e papel foram usados como camada dielétrica nos dispositivos contendo politiofeno como material da camada ativa. PMMA foi usado em transistores do tipo top-gate devido à dificuldade de se obter a estrutura bottom-gate causada por problemas de incompatibilidade de solventes. Por outro lado, a resina curável SU-8 se destaca como potencial candidato para fabricação de estruturas bottom-gate. Sendo uma resina curável, a incompatibilidade de solventes deixa de ser um problema para a construção de transistores com essa estrutura. No caso do transistor usando papel como substrato, foi observada uma modulação da mobilidade de buracos no semicondutor mostrando que o papel atua não só como substrato, mas como camada dielétrica.

Palavras-chave: Transistor. Eletrônica. Orgânica.

Referências

1 IBRAHIM,M.M.; MACIEL, A. C.; WATSON, C. P.; MADEC, M. M.; YEATES, S. G.; TAYLOR, D. M. Thermo-mechanical stabilisation of a crystalline organic semiconductor for robust large area electronics **Organic Electronics**, v. 11, n. 7, p. 1234-1241, 2010. DOI: 10.1016/j.orgel.2010.04.030.

PG-127B - Study of p-type organic field effect transistors to application in flexible electronics

MACIEL, Alexandre de Castro¹; FARIA, Roberto Mendonça¹

acmaciel@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

We report in this paper four different p-type organic field effect transistors made of polythiophene and pentacene as semiconductors. Silicon wafers, glass and paper have been used as substrates in the intention of characterize the OFETs to future application in flexible substrates as PET and paper as well. The thermal-mechanical stabilization of semi-crystalline semiconductors was studied using pentacene based material. In this case SiO₂ was used as dielectric. Polymethyl methacrylate (PMMA), SU-8 and paper were used as dielectric to study the polythiophene based transistors. PMMA has been used in the top-gate structure because it is very difficult to obtain the inverted structure due to solvent compatibility problems. On the other hand, SU-8 revealed to be effective material in the fabrication of bottom-gate structure. Since this resin is UV curable, the solvent compatibility is no longer a problem. In the case of transistor having paper as substrate, it was observed a field effect on the mobility modulation showing that the paper acts also as the dielectric layer.

Keywords: Transistors. Electronic. Organic.

References

- 1 IBRAHIM,M.M.; MACIEL, A. C.; WATSON, C. P.; MADEC, M. M.; YEATES, S. G.; TAYLOR, D. M. Thermo-mechanical stabilisation of a crystalline organic semiconductor for robust large area electronics **Organic Electronics**, v. 11, n. 7, p. 1234-1241, 2010. DOI: 10.1016/j.orgel.2010.04.030.

PG-128A – Desenvolvimento de cimento sustentável: tecnologia de baixo carbono através da nanociência

CHAVES, Anderson Silva¹; SOUZA, Milton Ferreira de¹

ascbonelli@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Cimento é uma mercadoria estratégica de vital importância, porém é responsável por 5-8% das emissões globais de CO₂ (1). Devido ao cenário climático atual, um dos principais desafios para a indústria cimenteira é reduzir as emissões de gases de efeito estufa através do desenvolvimento inovador e sustentável desses materiais. Qualquer pequena melhora no desempenho do cimento poderia induzir enormes benefícios ambientais. Quando cimento e água são misturados, silicato de cálcio hidratado (C-S-H) precipita como aglomerados de partículas coloidais em nanoscalas, sendo o produto primário da hidratação e a principal fase para adesão do cimento Portland (2). É amplamente aceito que a estrutura do C-S-H em nanoscalas controla muitas propriedades macroscópicas, tais como o módulo elástico, fluência e retração de secagem (3). Assim, uma forma possível para melhorar a sustentabilidade do uso de concreto é melhorar o desempenho mecânico do gel de C-S-H. A estrutura atômica da menor unidade do C-S-H é uma estrutura cristalina lamelar semelhante à dos minerais tobermorita ou jennita, com uma espessura de lamela na faixa de nm (4). Várias propriedades do C-S-H encontradas em pastas de cimento hidratado são baseadas na existência de um bloco < 5 nm de diâmetro no gel de C-S-H (5). No entanto, por que esses nanogrãos não crescem maiores? E o que determina como esses blocos se aglomeram nas diferentes escalas? Neste estudo, cristais maiores de C-S-H foram obtidos por métodos hidrotérmicos usando uma mistura pozolânica. Nossa investigação mostrou que amostras curadas em mais altas temperaturas possuem blocos de C-S-H que podem possuir alguns nm de comprimento e mais de 100 nm de largura. Mais surpreendente é o alinhamento das próprias partículas em uma ordem nemática quando C-S-H é crescido sobre ou próximo a uma superfície cristalina. O objetivo principal deste estudo é investigar, pela primeira vez, a incorporação desses grandes cristais de C-S-H como sementes de nucleação na hidratação do cimento e fornecer uma base mais inteligente para projetar concretos com propriedades melhoradas.

Palavras-chave: Cimento sustentável. Silicato de cálcio hidratado. Semente de nucleação.

Referências

1 WORLD BUSINESS COUNCIL FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. **Cement technology roadmap 2009**: carbon emissions reductions up to 2050. Geneva, Switzerland: IEA, 2009. Disponível em: < http://www.iea.org/papers/2009/Cement_Roadmap.pdf>. Acesso em: Set. 2011.

2 ALLEN, A. J. et al. Composition and density of nanoscale calcium–silicate–hydrate in cement. **Nature Materials**, v. 6, p. 311–316, 2007. DOI:10.1038/nmat1871.

3 PELLENQ, R. J. M. et al. A realistic molecular model of cement hydrates. **Proceedings of the National Academy of Science of the United State of America**, v. 106, p. 16102–16107, 2009. DOI: 10.1073/pnas.0902180106.

4 SKINNER, L. B. et al. Nanostructure of calcium silicate hydrates in cements. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 19, p. 1–4, 2010.

PG-128B – Nanoengineering green cement: low carbon technology through nanoscience

CHAVES, Anderson Silva¹; SOUZA, Milton Ferreira de¹

ascbonelli@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Cement is a vital strategic commodity but creates 5-8% of man-made CO₂ (1). Due to the present climate scenario, one of the key near-term challenges for the cement industry is to reduce the greenhouse gas emissions by developing innovative and sustainable cement-based material solutions. Any small improvement on cement performance could induce huge environmental benefits. When cement and water are mixed, calcium silicate hydrate (C-S-H) precipitates as clusters of nanoscale colloidal particles and it is the primary hydration product and binding phase of Portland cement paste (2). For C-S-H it is widely accepted that the nanoscale structure controls many engineering properties such as the elastic moduli, creep and drying shrinkage (3). Thus, one possible way to improve the sustainability of concrete use is to improve the mechanical performance of the C-S-H gel. The atomic structure of the smallest C-S-H unit is a layered crystal structure akin to that of the mineral tobermorite or to that of jennite, with a lamella thickness in the nm range (4). Several bulk properties of C-S-H found in hydrated cement pastes is based on the existence of a <5 nm diameter building block in C-S-H gel (5). However, why do these nanograins not grow larger? And what determines how the bricks assemble together at greater length scales? In this study, large C-S-H crystals were obtained from autoclaved methods using a pozzolanic mixture. Our investigation showed that heat-cured samples possess C-S-H that can be several μm long and more than 100 nm wide. More surprising is the alignment of the particles themselves in a nematic order when C-S-H is grown on or close to a single crystal surface. The main objective of this study is to investigate, for the first time, the incorporation of these large C-S-H crystals as nucleation seeds on hydration of cement and provide a basis for intelligently designing concrete with enhanced properties.

Keywords: Green cement. Calcium silicate hydrate. Nucleation seeding.

References

- 1 WORLD BUSINESS COUNCIL FOR SUSTAINABLE DEVELOPMENT. **Cement technology roadmap 2009**: carbon emissions reductions up to 2050. Geneva, Switzerland: IEA, 2009. Disponível em: < http://www.iea.org/papers/2009/Cement_Roadmap.pdf>. Acesso em: Sept. 2011.
- 2 ALLEN, A. J. et al. Composition and density of nanoscale calcium–silicate–hydrate in cement. **Nature Materials**, v. 6, p. 311–316, 2007. DOI:10.1038/nmat1871.
- 3 PELLENQ, R.J.M. et al. A realistic molecular model of cement hydrates. **Proceedings of the National Academy of Science of the United State of America**, v. 106, p. 16102–16107, 2009. DOI: 10.1073/pnas.0902180106.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

- 4 SKINNER, L. B. et al. Nanostructure of calcium silicate hydrates in cements. **Physical Review Letters**, v. 104, n. 19, p. 1–4, 2010.

PG-129A - Síntese do composto $\text{SrTi}(1-x)\text{W}_x\text{O}(3+x)$ ($x=0, 1$) através do método dos precursores poliméricos

ESCANHOELA JÚNIOR, Carlos Augusto¹; MASTELARO, Valmor Roberto¹

escanhoela@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Os materiais de estrutura perovskita, ABO₃, compreendem um grupo de compostos que apresenta um alto grau de flexibilidade em acomodar uma variedade de átomos nos sítios A e B, permitindo controlar algumas propriedades físicas e químicas do material. O controle destas propriedades permite que tais materiais possam atuar como capacitores, varistores, fotoeletrodos, memórias ferroelétricas ou sensores de grãos (1). O titanato de estrôncio, SrTiO₃, é um material amplamente estudado devido a facilidade de incorporar diferentes íons em sua estrutura. Neste trabalho, será analisada o efeito da substituição do Ti⁴⁺ pelo W⁶⁺, formando o SrTi(1-x)W_xO(3+x), nas propriedades estruturais e elétricas do material base. Inicialmente, nanopartículas de SrTi(1-x)W_xO(3+x), ($x=0, 1$) foram sintetizadas na forma de pó através do método Pechini (2, 3). As amostras foram caracterizadas estruturalmente por difração de raios X (DRX) e termicamente por calorimetria diferencial de varredura (DSC). Os resultados de DRX indicam a obtenção de fase única para as duas composições, sendo que o SrTiO₃ apresenta uma estrutura cúbica e o SrWO₄ estrutura tetragonal. As curvas de DSC revelam a presença de um pico exotérmico referente à cristalização das amostras. A síntese através do método Pechini mostrou-se eficiente para obtenção SrTi(1-x)W_xO(3+x) ($x=0, 1$) monofásico.

Palavras-chave: Perovskita. Método Pechini. Sensores de grãos.

Referências

- 1 FERGUS, J. W Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors. **Sensor and Actuators B**, v. 123, n. 2, p. 1169-1179, 2007.
- 2 DA SILVA, L. F.; BERNARDI, M. I. B.; MAIA, L. J. Q.; FRIGO, G. J. M.; MASTELARO, V. R. Synthesis and thermal decomposition of SrTi_{1-x}Fex O₃ (0.0 ≤ X ≤ 0.1) powders obtained by the polymeric precursor method. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 97, n. 1, p. 173-177, 2009.
- 3 PONTES, F. M.; GALHIANE, M. S.; SANTOS, L. S.; PETIT, L. A.; KATAOKA, F. P.; MABUCHI, G. H.; LONGO, E.; ZAMPIERI, M.; PIZANI, P. S. Polymeric precursor method to the synthesis of XWO₄ (X = Ca and Sr) thin films; structural, microstructural and spectroscopic investigations. **Journal of Alloys and Compounds**, v. 477, p. 608-618, 2009.

PG-130A - Desenvolvimento de métodos avançados em RMN em campo externo nulo para o estudo de materiais magnéticos via RMN

ASCONA, Christian Rivera¹; SILVA, Rodrigo de Oliveria¹; CARVALHO, João Teles de²; TOZONI, José Roberto³; VIDOTO, Edson Luiz Géa¹; BONAGAMBA, Tito Jose¹
chrisrivera127@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Centro de Ciências Agrárias - Universidade Federal de São Carlos

³ Instituto de Física - Universidade Federal de Uberlândia

O estudo de materiais magnéticos usando-se Ressonância Magnética Nuclear em campo magnético externo nulo (RMNz), via a análise e manipulação das transições entre os estados de energia nucleares é uma ferramenta importante no processo de caracterização das propriedades elétricas e magnéticas desses materiais. Na aplicação de dois ou mais pulsos de radiofrequência (RF) foram observados ecos de múltiplo quantum (MQ). O aparecimento destes múltiplos ecos está relacionado com as distribuições dos acoplamentos Zeeman e/ou quadrupolar elétrica que existem na região onde o eco se origina. Discretizando as fases dos pulsos de RF de maneira conveniente podem ser selecionadas transições de MQ específicas. Os resultados teóricos obtidos da aplicação de mais de dois pulsos de RF mostram grande potencial para o desenvolvimento de métodos bidimensionais, que permitirão a construção de espectros que correlacionam diferentes coerências de MQ. Para isso, é necessário o desenvolvimento da teoria complementar para o entendimento dos sinais de RMN obtidos após a aplicação de n pulsos de RF, o que fornecerá uma maior riqueza de informações sobre os sistemas físicos estudados.

Palavras-chave: RMN sem campo magnéticoexterno. Ecos de múltiplo quantum. Seleção de coerências.

Referências

- 1 POLULYAKH, S. N.; SERGEEV, N. A.; SHEMYAKOV,A. A. Spectra of multiquantum Echo signals from quadrupole nuclei with half-integral spin in magnetically ordered materials. **Physics of the Solid State**, v. 42, n. 9, p. 1675, 2000.
- 2 TELES, J.;DEAZEVEDO, E. R.; AUCCAISE,R.; SARTHOUR, R. S.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system. **Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 5, p. 154, 2007.
- 3 TOZONI, J. R.; TELES, J.; AUCCAISE, R.; OLIVEIRA-SILVA, R.; RIVERA-ASCONA, C.; VIDOTO, E. L. G.; GUIMARÃES, A. P.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J. Multi-quantum echoes in GdAl₂ zero-field high-resolution NMR. **Journal of Magnetic Resonance**, 2011. In press.

PG-131A - Desenvolvimento de espetrômetros de ressonância magnética e quadrupolar nuclear para aplicações em ciência do petróleo, ciência dos materiais e informação quântica

BRAZ, Daniel Cesar¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; BONAGAMBA, Tito José¹

dcbraz@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) sofreu nos últimos 50 anos um crescimento vertiginoso, que resultou na sua utilização em várias áreas do conhecimento, não se limitando apenas à Física e à Química. O aumento da utilização desta técnica foi acompanhado pelo colossal aumento dos preços dos espetrômetros. No entanto, existem várias aplicações importantes da RMN que podem ser desenvolvidas com equipamentos de baixo custo. Além disso, uma técnica importante, de baixíssimo custo e muito similar à RMN foi praticamente abandonada nos últimos anos, a Ressonância Quadrupolar Nuclear (RQN). A facilidade e o baixo custo para construir espetrômetros de RMN e RQN destinados a várias aplicações importantes (e.g. meios porosos – rochas petrolíferas e ossos -, materiais magnéticos), aliados à experiência do nosso grupo de pesquisa na manipulação de spins nucleares, advinda do desenvolvimento de instrumentação e métodos avançados de RMN, incluindo Informação e Computação Quântica (ICQ), permite propor esse trabalho de doutorado. Nesse trabalho, pretende-se desenvolver espetrômetros de baixo custo para as aplicações citadas anteriormente, com o desenvolvimento de magnetos resistivos de baixo campo, sondas de RMN/RQN, transmissores e receptores de radiofrequência (rf), entre outros elementos essenciais dos espetrômetros. Será estudada a possibilidade de desenvolvimento de arquitetura de controle dos espetrômetros que será embarcada em FPGA (Field-Programmable Gate Array), e de desenvolvimento de softwares para o processamento dos sinais adquiridos, que, tradicionalmente, envolvem transformadas de Fourier e inversa de Laplace.

Palavras-chave: Espectrômetro. RMN. RQN.

Referências:

- 1 BONAGAMBA, T. J. **Espectroscopia de alta resolução em sólidos por ressonância magnética nuclear (construção de um espetrômetro de alta resolução em sólidos por RMN).** 1991. 141 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1991.
- 2 VIDOTO, E. L. G. **Projeto de transdutores e otimização do sistema de recepção do tomógrafo de RMN de campo magnético ultra-baixo.** 1995. 116 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1995.
- 3 FUKUSHIMA, E.; ROEDER, S. B. W. **Experimental pulse NMR - a nuts and bolts approach.** Reading, Mass: Addison-Wesley, 1981.

PG-132A - Células fotovoltaicas híbridas: arquiteturas baseadas em efeitos fotônicos e plasmônicos

COUTINHO, Douglas José¹; FARIA, Roberto Mendonça¹

douglas@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Esse trabalho tem por objetivo a fabricação de células fotovoltaicas de terceira geração, isto é, tendo como camada ativa filmes finos de polímeros eletrônicos combinados com materiais inorgânicos eletronegativos. Para isso, usaremos estruturas envolvendo um eletrodo transparente (ITO, por exemplo), uma camada transportadora de buracos (PEDOT:PSS), e como camada ativa, polímeros eletrônicos (da família dos politiofenos ou dos polifenileno-vinilenos) combinados com nanopartículas de TiO₂ ou de fulerenos, e finalmente um contato elétrico de alumínio e cálcio. Essas estruturas de dispositivos têm sido denominadas de híbridas. Nessas células, a separação de carga fotoinduzida é facilitada pela grande área interfacial entre doador e receptor, e filmes híbridos vêm mostrando ótimas eficiências de fotoconversão. A diminuição da recombinação de carga devido às nanopartículas é o fator mais importante para aumentar a eficiência dessas células.

Palavras-chave: Células fotovoltaicas híbridas. Heterojunção de volume. TiO₂.

Referências

1 YAMAMOTO, Takakazu et al. π -conjugated donor–acceptor copolymers constituted of π -excessive and π -deficient arylene units: optical and electrochemical properties in relation to CT structure of the polymer **Journal of the American Chemical Society**, Washington, DC, v. 118, n. 43, p. 10389-10399, 1996. DOI: 10.1021/ja961550t.

PG-133A - Monitoramento óptico do processo de sacarificação e fermentação do mosto cervejeiro em tempo real

ESTRACANHOLLI, Éverton Sérgio¹; KURACHI, Cristina¹; POLIKARPOV, Igor¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

evertonse@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O mercado de cerveja do Brasil está entre os cinco maiores mercados do mundo, apresentando forte internacionalização e balança comercial extremamente favorável. A fabricação de cerveja passa por um processo biotecnológico relativamente longo e complexo, podendo gerar uma gama de produtos com qualidades e características organolépticas distintas e imprescindíveis para um determinado tipo de produto que se almeja obter. Falhas em etapas importantes como, por exemplo, cozimento e fermentação podem gerar perdas de milhões de litros da bebida e grandes perdas financeiras. Em etapas específicas, pequenas modificações no processo ou em quantidades de determinados ingredientes podem alterar o produto de forma a este não se enquadrar em um padrão pré-determinado. Nesta proposta estamos objetivando desenvolver um sistema para monitoração da qualidade da cerveja on-line durante o processo de fabricação, visando medir parâmetros físico-químicos desta, diminuindo erros na fabricação e aumentar a qualidade do produto e robustez do processo. Para isso, será desenvolvido uma plataforma integrada de instrumentação analítica (hardware) e diagnóstico via processamento neural (inteligência artificial). A primeira delas baseia-se na análise espectral de absorbância na região do infravermelho médio (entre 900 cm⁻¹ e 1800 cm⁻¹) da cerveja on-line durante o processo de fabricação. A segunda tecnologia baseia-se na identificação de padrões e das principais variáveis do processo que definem a qualidade e características do produto final. O desenvolvimento de instrumentação com grau suficiente de especificidade, que seja capaz de ser empregado em condições industriais de operação, é extremamente oneroso e complexo. Uma alternativa inovadora para isto consiste em discriminar estes sinais com auxílio de um banco de filtros neurais previamente treinados. Esse sistema será instalado junto ao sistema de cozimento e aos tanques de fermentação, onde estas variáveis podem ser monitoradas e corrigidas.

Palavras-chave: Cerveja. Absorbância no infravermelho. Espectroscopia.

Referências

1 LEWIS, M. J.; YOUNG, T. W. **Brewing**. 2nd ed. New York: Springer Verlag, 2004.

2 FIX, G. **Principles of brewing science**. 2nd. ed. New York: Brewers Publications, 1999.

3 DUARTE, L. F.; BARROS, A.; ALMEIDA, C.; SPRAUL, M.; GIL, A. M. Multivariate analysis of NMR and FTIR data as a potential tool for the quality control of beer. **Journal Agricultural and Food Chemistry**, v. 52, n. 5, p. 1031-1038, 2004.

PG-133B - Optical monitoring of wort saccharification and fermentation in real time

ESTRACANHOLLI, Éverton Sérgio¹; KURACHI, Cristina¹; POLIKARPOV, Igor¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹
evertonse@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Beer market in Brazil is among the five largest markets in the world, with strong internationalization and extremely favorable trade balance. Beer brewing is a relatively long and complex biotechnological process that can generate a big range of products with distinct quality and organoleptic characteristics indispensable to differentiate types of beer. Failures in important steps as mashing and fermentation process can lead to losses of millions of liters of beer and consequently financial losses. Currently, analyses of physical-chemical process are carried out offline using traditional tests with no real time response, e.g. : HPLC (High Performance Liquid Chromatography). In the case of small brewery, which is an area in steady growth, some of these tests are not performed due to the high cost of needed equipment. When some problems are detected, is already in the end of the brewery process. The solution is time consuming and can compromise the quality of the whole production. In this study we aim to develop a system to monitor in real time (on line) the saccharification and fermentation of beer during the manufacturing process. These physical and chemical measurements will allow fewer errors during the beer fabrication, increasing the quality of the final product and optimizing the enzymatic reactions. The principle of this work is based on analyses of spectral absorbance in infrared region using a system based in Fourier Transform Infrared spectroscopy (FTIR) during the beer manufacturing process. These optical techniques show great advantages because they can be easily adapted to industrial equipments, providing real-time responses with high specificity and sensitivity.

Keywords: Beer. FTIR. Spectroscopy.

References

- 1 LEWIS, M. J.; YOUNG, T. W. **Brewing**. 2nd ed. New York: Springer Verlag, 2004.
- 2 FIX, G. **Principles of brewing science**. 2nd. ed. New York: Brewers Publications, 1999.
- 3 DUARTE, L. F.; BARROS, A.; ALMEIDA, C.; SPRAUL, M.; GIL, A. M. Multivariate analysis of NMR and FTIR data as a potential tool for the quality control of beer. **Journal Agricultural and Food Chemistry**, v. 52, n. 5, p. 1031-1038, 2004.

PG-134A - Fotofísica de sistemas moleculares automontado na superfície de nanopartículas e sua aplicação em sistemas biológicos e em tratamentos medicinais

TSUTAE, Fernando Massayuki¹; GUIMARAES, Francisco Eduardo Gontijo¹

f.tsutae@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Sistemas moleculares complexados com nanopartículas (NPs) são de grande interesse nas áreas de modificação e transformação de energia em células de combustíveis (1) e fotovoltaicas (2), assim como em sistemas carregadores e liberadores de drogas (3) contendo especificidade celular para o tratamento de doenças como o câncer (4). Além disso, os processos ópticos e as alterações moleculares produzidas pelas interações superficiais e com o solvente nesse sistema contendo alta densidade molecular ainda são pouco entendidos. O presente trabalho de doutoramento tem como objetivo estudar os processos ópticos em sistemas moleculares automontados na superfície de NPs. Sistemas moleculares mais complexos serão depositados sobre NPs utilizando metodologias de automontagem e de arraste molecular. Os processos ópticos em moléculas, tais como porfirinas, cromóforos e polímeros emissores de luz, podem ser alterados quando complexadas na superfície de NPs (5). Por exemplo, processos de transferência de carga (6,7) podem ser importantes e a taxa de geração de oxigênio singuleto pode ser fortemente alterada por moléculas complexadas sobre NPs (8). Pretendemos estudar efeitos de fotodegradação e dissociação de excitons e transferência de carga em células fotovoltaicas orgânicas de terceira geração que usam NPs aceitadoras ou doadoras de carga. A interação, empacotamento, carregamento e liberação molecular em um meio líquido específico serão considerados neste trabalho, bem como a interação com monocamadas intermediárias automontadas sobre as NPs. Serão consideradas NPs metálicas como TiO₂ e ZnO complexadas com biomateriais. A caracterização dos processos ópticos envolvidos serão feitos por espectroscopia de fluorescência, de absorção e de excitação. Será utilizada microscopia de alta resolução espacial e temporal (ps-ns) e de molécula isolada complexada com NPs no estudo da geração e decaimento radiativo resolvido no tempo de excitons nesse sistema, o que pode dar informação sobre as interações e estruturas moleculares.

Palavras-chave: Nanopartículas. Biomateriais. Adsorção.

Referências

- 1 PARK, J.; YI, J.; TACHIKAWA, T.; MAJIMA, T.; CHOI, W. Guanidinium-enhanced production of hydrogen on nafion-coated dye/TiO₂ under visible light. **Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 1, n. 9, p. 1351–1355, 2010.
- 2 HAINS, A. W.; LIANG, Z.; WOODHOUSE, M. A.; GREGG, B. A. Molecular semiconductors in organic photovoltaic cells. **Chemical Reviews**, v. 110, n. 11, p. 6689-6735, 2010.

- 3 SOPPIMATH, K. S.; AMINABHAVI, T. M.; KULKARNI, A. R.; RUDZINSKI, W. E. Biodegradable polymeric nanoparticles as drug delivery devices. **Journal of Controlled Release**, v. 70, n. 1, p. 1–20, 2001.
- 4 PEER, D.; KARP, J. M.; HONG, S.; FAROKHZAD, O. C.; MARGALIT, R.; LANGER, R. Nanocarriers as an emerging platform for cancer therapy. **Nature Nanotechnology**, v. 2, n. 12, p. 751–760, 2007.
- 5 PARK, H.; BAE, E.; LEE, J. J.; PARK, J.; CHOI, W. Effect of the anchoring group in ru-bipyridyl sensitizers on the photoelectrochemical behavior of dye-sensitized TiO₂ electrodes: carboxylate versus phosphonate linkages. **Journal of Physical Chemistry B**, v. 110, n. 17, p. 8740–8749, 2006.
- 6 GERFIN, T.; GRATZEL, M.; WALDER, L. Molecular and supramolecular surface modification of nanocrystalline TiO₂ films: charge-separating and charge-injecting devices. In: MEYER, G. J. **Molecular level artificial photosynthetic materials**. New York: Wiley Interscience, 1977. p. 345–393. (Progress in Inorganic Chemistry, v. 44).
- 7 STOCKWELL, D.; YANG, Y.; HUANG, J.; ANFUSO, C.; HUANG, Z.; LIAN, T. Comparison of electron–transfer dynamics from coumarin 343 to TiO₂, SnO₂ and ZnO nanocrystalline thin films: role of interface-bound charge-separated pairs **The Journal of Physical Chemistry C**, v. 114, n. 14, p. 6560–6566, 2010.
- 8 LI, W.; GANDRA, N.; ELLIS, E. D.; COURTNEY, S.; LI, S.; BUTLER, E.; GAO, R. pH-responsive, TiO₂-attached porphyrin for singlet oxygen production in an aqueous solution. **ACS Applied Materials & Interfaces**, v. 1, n. 8, p. 1778–1784, Aug. 2009.

PG-135A - Estrutura e dinâmica molecular de poly(9,9-dioctylfluoren-2,7-diyl-co-benzothiadiazole) (F8BT) e correlações com propriedades elétricas

FARIA, Gregório Couto¹; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹

gcfaria@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O projeto de doutorado intitulado “Correlação das Propriedades Óticas e Elétricas com a Estrutura Física e Dinâmica Molecular de Filmes e Dispositivos de Polifluorenos e Derivados”. O primeiro é especificamente ligado a investigação da dinâmica molecular, conformação estrutural e empacotamento de polímeros derivados do polifluoreno. Para isso, Difração de Raio-X de Alto Ângulo (WAXD) 1, Ressonância Magnética no Estado Sólido (RMN) e Análise Térmica Dinâmico Mecânica (DMTA) serão utilizadas como técnicas principais. O segundo objetivo é o de correlacionar, os fenômenos observados na primeira parte do projeto, com as propriedades opto-eletrônicas dos filmes poliméricos sendo utilizados como camada ativa em dispositivos eletrônicos do tipo Diodo Polimérico Emissor de Luz (PLED). Na segunda parte, a fabricação dos dispositivos e sua caracterização como função da temperatura serão os principais objetivos. Espectroscopia de Impedância, Corrente-Voltagem e Tempo de Vôo (TOF) serão as principais técnicas de caracterização utilizadas. Dessa forma, o projeto combina estudos fundamentais de aspectos moleculares com o desempenho tecnológica de dispositivos optoeletrônicos.

Palavras-chave: Mobilidade de portadores. Polímeros. Dinâmica molecular.

Referências

1 FARIA, G. C. et al. A multitechnique study of structure and dynamics of polyfluorene cast films and the influence on their photoluminescence. **Journal of Physics Chemistry B**, v. 113, n. 33, p. 11403-11413, 2009.

PG-136A - Desenvolvimento de microcavidades ópticas com janelas de transmissão no visível e infravermelho próximo

GALLO, Ivan Braga¹; ZANATTA, Antonio Ricardo¹

ivanbragagalho@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Além de possibilitar o desenvolvimento de dispositivos com maior capacidade de processamento, as estruturas fotônicas também podem ser amplamente usadas na fabricação de lasers e LEDs. Dentre essas estruturas é importante destacar as microcavidades ópticas (MCs) (1). Formadas por um meio ativo colocado entre dois espelhos de Bragg (DBR – Distributed Bragg Reflector) essas cavidades podem ser construídas mediante técnicas como Sol-gel (2), Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) (3), entre outras. Neste contexto, o presente trabalho tem por objetivo a construção de duas microcavidades ópticas: uma com janela de transmissão na região do visível (MC-VIS), sendo o meio ativo composto por a-SiN(Tb), e outra com uma janela de transmissão no infravermelho próximo (MC-NIR) com camada ativa constituída de a-SiN(Er). Ambas as cavidades foram preparadas pela técnica de sputtering de rádio frequência. No caso da MC com janela de transmissão no visível os espelhos de Bragg são formados por oito camadas alternadas de a-SiH e a-SiN. Seis camadas alternadas de a-Si e a-SiN formam cada DBR usado na fabricação da MC para o infravermelho. Após a deposição, as cavidades foram submetidas a medidas de reflexão (com ângulos de incidência iguais a 15, 30 e 45°) e de transmissão óptica (incidência normal) na região do UV-VIS-IR. Os resultados mostram que a MC-VIS de fato apresenta uma janela de transmissão em ~ 550 nm enquanto a MC-NIR possui uma janela em ~ 1600 nm. No presente trabalho serão apresentadas e discutidas a influência da geometria de medida e da espessura das camadas sobre a janela de transmissão das respectivas cavidades.

Palavras-chave: Silício. Microcavidade óptica. Luminescência.

Referências

- 1 YOKOYAMA, H.; UJIHARA, K. **Spontaneous emission and laser oscillation in microcavities**. Boca Raton: CRC Press, 1995. 374 p.
- 2 LI, Y.; FORTES, L. M.; CHIAPPINI, A.; FERRARI, M.; ALMEIDA, R. M. High quality factor Er-doped Fabry-Perot microcavities by sol-gel processing. **Journal of Physics D: applied physics**, v. 42, n. 20, p. 205104, Oct. 2009. DOI: 10.1088/0022-3727/42/20/205104.
- 3 GIORGIS, F.; BALLARINI, V.; FERRERO, S.; MANDRACCI, P.; RICCIARDI, C.; PIRRI, C. F. Luminescence properties of amorphous silicon-nitride-based optical microcavities. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 299, p. 653-657, Apr. 2002. DOI: 10.1016/S0022-3093(01)01028-6.

PG-136B - Development of optical microcavities with transmission windows in the visible and near-infrared

GALLO, Ivan Braga¹; ZANATTA, Antonio Ricardo¹

ivanbragagalho@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Besides allowing the development of devices with a greater processing capacity, the photonic structures can be also largely used in the fabrication of lasers and LEDs. Among these structures it is important to highlight the optical microcavities (MCs) (1). Formed by an active medium put between two Bragg mirrors (DBR – Distributed Bragg Reflectors) these cavities can be fabricated through techniques like Sol-gel (2), Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) (3), and others. In this context, the goal of the work reported here is the fabrication of two optical microcavities: one with transmission window in the visible region (MC-VIS), with an active medium composed of a-SiN(Tb), and another one with a transmission window in the near-infrared (MC-NIR) with an active layer of a-SiN(Er). Both cavities were prepared by the radio frequency sputtering technique. In the case of the MC with a transmission window in the visible range the Bragg mirrors are formed by eight alternating layers of a-SiH and a-SiN. Six alternating layers of a-Si and a-SiN form each DBR used in the fabrication of the MC to the infrared. After the deposition, the cavities were submitted to reflexion (with incidence angles equal to 15, 30 and 45°) and optical transmission (normal incidence) measurements in the UV-VIS-IR region. The results show that the MC-VIS really has a transmission window at ~ 550 nm while the MC-NIR has a window at ~ 1600 nm. This study will present and discuss the influence of the measurement geometry and of the thickness of the layers over the transmission window of the cavities.

Keywords: Silicon. Optical Microcavity. Luminescence.

Referências

- 1 YOKOYAMA, H.; UJIHARA, K. **Spontaneous emission and laser oscillation in microcavities**. Boca Raton: CRC Press, 1995. 374 p.
- 2 LI, Y.; FORTES, L. M.; CHIAPPINI, A.; FERRARI, M.; ALMEIDA, R. M. High quality factor Er-doped Fabry-Perot microcavities by sol-gel processing. **Journal of Physics D: applied physics**, v. 42, n. 20, p. 205104, Oct. 2009. DOI: 10.1088/0022-3727/42/20/205104.
- 3 GIORGIS, F.; BALLARINI, V.; FERRERO, S.; MANDRACCI, P.; RICCIARDI, C.; PIRRI, C. F. Luminescence properties of amorphous silicon-nitride-based optical microcavities. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 299, p. 653-657, Apr. 2002. DOI: 10.1016/S0022-3093(01)01028-6.

PG-137A - Possibilidade de predição em tempo real da terapia fotodinâmica – correlação da espectroscopia de fluorescência e profundidade de necrose

VOLLET FILHO, José Dirceu¹; MORIYAMA, Lilian Tan¹; GRECCO, Clóvis¹; FERREIRA, Juliana²; KURACHI, Cristina¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹

¹ josedirceu@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento - Universidade Vale do Paraíba

Uma das dificuldades na terapia fotodinâmica (TFD) é a eliminação incompleta de lesões, por dificuldades na entrega apropriada de luz e fotossensibilizador (FS), e por consumo do oxigênio disponível. A reação fotodinâmica também degrada parte das moléculas de FS, o que reduz a efetividade do tratamento. Uma vez que há relação entre dano e degradação do FS, e que o FS é uma substância altamente fluorescente (1), o objetivo é obter um modelo para predizer a profundidade de necrose (dnec) obtida pela TFD usando características ópticas do tecido, fluência e intensidade de luz, e a fluorescência coletada durante o tratamento. Foram usados 57 ratos Wistar em diferentes grupos (150/250/350 mW/cm²) para TFD, usando o FS Photogem® (30 min entre aplicação/luz). Um laser de diodo (630nm) foi usado como fonte, e a excitação da fluorescência obtida usando 532 nm (laser Nd:YAG dobrado). Trinta horas após o tratamento, as dnec foram medidas. Os dados foram aplicados ao modelo e a relação fluorescência/dnec estabelecida. Obteve-se um modelo que é capaz de predizer, uma vez conhecidas as condições de tratamento, a degradação do FS e a dnec com reprodução razoável dos experimentos. Um parâmetro Ψ (produto da fluorescência normalizada pelos valores de dnec) foi determinado para permitir predição da dnec conhecendo Ψ para dadas condições de tratamento. O modelo é mais simplificado que outros presentes em trabalhos da literatura (2), mas pode ser facilmente incorporado na prática clínica para avaliar o dano em tecidos. Agradecimentos: CAPES, FAPESP, CNPq.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Dosimetria. Degradação.

Referências

1 VOLLET-FILHO, J. D.; MENEZES, P. F. C.; MORIYAMA, L. T.; GRECCO, C.; SIBATA, C.; ALLISON, R. R.; CASTRO E SILVA JUNIOR., O.; BAGNATO, V. S. Possibility for a full optical determination of photodynamic therapy outcome. *Journal of Applied Physics*, v. 105, n. 10, p. 102038, 2009. DOI:10.1063/1.3116610 .

2 FARRELL, T. J.; HAWKES, R. P.; PATTERSON, M. S.; WILSON, B. C. Modeling of photosensitizer fluorescence emission and photobleaching for photodynamic therapy dosimetry. *Applied Optics*, v. 37, n. 31, p. 7168–7183, 1998.

PG-138A - Imobilização de metaloftalocianinas e nanotubos de carbono em filmes nanoestruturados para aplicações em biosensores

CENTURION, Lilian Maria Pessoa da Cruz¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹

lilian@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O desenvolvimento da nanociência e da nanotecnologia nos últimos anos criou uma nova fronteira no estudo da matéria, permitindo que compostos já conhecidos tenham suas propriedades redescobertas ao serem manipulados em nível molecular. Os nanotubos de carbono são um dos materiais mais promissores deste campo, por apresentarem propriedades mecânicas, térmicas e elétricas que os tornam apropriados para o desenvolvimento de dispositivos, especialmente na área de eletrônica e sensores. As metaloftalocianinas são moléculas macrocíclicas que vêm sendo imobilizadas há décadas devido à grande variedade de aplicações que elas proporcionam. A proposta deste estudo é a imobilização de nanotubos de carbono e metaloftalocianinas em filmes automontados, visando-se combinar propriedades de interesse destes dois materiais para aplicação em biosensores. Estes materiais foram usados na composição de filmes automontados contendo poli(amidoamina) geração 2 como policáton. Medidas de espectroscopia UV-visível revelaram que ambos os poliâniions apresentam deposição exponencial sobre substratos de vidro. As propriedades elétricas destes sistemas foram investigadas por voltametria cíclica em eletrólito H₂SO₄ 0,1 mol.L⁻¹. Estes experimentos revelaram que, nestas condições de imobilização, há um ombro de redução em -0,7 V associado à primeira redução do macrociclo de ftalocianina (1) e um pico de redução em 0,12 V provocado pela oxirredução dos grupos carboxílicos introduzidos durante o processo de funcionalização dos nanotubos de carbono (2); esta corrente catódica é governada por um processo de transferência de carga. O entendimento do comportamento eletroquímico destes sistemas pode levar à otimização da fabricação de sensores nanoestruturados por permitir um maior controle da fabricação da plataforma transdutora dos dispositivos.

Palavras-chave: Filmes automontados. Nanotubos de carbono. Metaloftalocianina.

Referências

- 1 KANG, T. F.; SHEN, G. L.; YU, R. Q. Voltammetric behaviour of dopamine at nickel phthalocyanine polymer modified electrodes and analytical applications. *Analytica Chimica Acta*, v. 356, n. 2-3, p. 245-251, 1997.
- 2 LUO, H.; SHI, Z.; LI, N.; GU, Z. Investigation of the electrochemical and electrocatalytic behavior of single-wall carbon nanotube film on a glassy carbon electrode. *Analytical Chemistry*, v. 73, n. 5, p. 915-920, 2001.

PG-139A - Espectroscopia ultrarrápida de polímeros semicondutores luminescentes

FALEIROS, Marcelo Meira¹; MIRANDA, Paulo Barbeitas¹

faleiros@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física - Universidade de São Paulo

Polímeros conjugados são semicondutores orgânicos que apresentam grandes vantagens sobre os inorgânicos, por exemplo, quanto a flexibilidade e baixo custo de processamento. Mas apesar do avanço tecnológico atual, temas importantes para o entendimento e otimização dos dispositivos optoeletrônicos poliméricos, como energia de ligação dos excitons e o mecanismo de geração de portadores de carga, ainda são polêmicos (1, 2). A transferência de energia por processos não radiativos em sistemas poliméricos do tipo “guest-host” também é um aspecto muito importante, pois sua dinâmica determina diretamente a eficiência de luminescência de um dispositivo. A espectroscopia ultrarrápida é uma técnica que permite investigar a dinâmica de processos ópticos na escala de tempo de dezenas de femtosegundos a alguns nanosegundos, tanto de processos luminescentes quanto de não luminescentes, o que torna esta técnica ideal para o estudo de sistemas poliméricos (3). Na técnica de bombeio e prova, uma amostra é excitada com um pulso de luz intenso e ultracurto (bombeio), que altera suas propriedades óticas. Essas propriedades são investigadas por meio de um pulso fraco de luz branca (prova) cujo atraso relativo ao pulso de excitação é variado. Mede-se a variação relativa na transmitância da amostra, entre a região excitada e uma porção não excitada (transmitância diferencial). Esta medida permite determinar o espectro de absorção não linear e os tempos de resposta característicos. Este projeto de doutorado tem dois objetivos principais: 1) montagem do aparato experimental para espectroscopia ultrarrápida de bombeio e prova, 2) estudo da transferência de energia em polímeros derivados do PPV, com excitação no ultravioleta, e em heteroestruturas automontadas de polímeros conjugados.

Palavras-chave: Polímeros semicondutores. Técnica de bombeio e prova. Dinâmica do estado excitado.

Referências

- 1 MIRANDA, P. B. et al. Ultrafast photogeneration of charged polarons in conjugated polymers. **Physical Review B**, v. 64, n. 8, p. 081201, Aug. 2001. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.081201.
- 2 KOLLER, A. et al. Charge separation in localized and delocalized electronic states in polymeric semiconductors. **Nature**, v.392,n.6679,p.903-906,Apr.1998.
- 3 GADERMAIER, C. et al. Photophysics of conjugated polymers: the contribution of ultrafast spectroscopy. **Journal of Physics-Condensed Matter**, v. 14, n. 42, p. 9785-9802. Oct. 2002. DOI: 10.1088/0953-8984/14/42/301.

PG-140A - Ambientes químicos de ácido tungstofosfórico hexahidratado estudados por ressonância magnética nuclear em estado sólido de ^1H e ^{31}P

OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de Oliveira¹; SCHNEIDER, José Fabian¹

mjunior@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Heteropolianions do tipo Keggin, como o ácido tungstofosfórico (HPW), apresentam grande aplicabilidade devido às suas propriedades físicas, como resposta fotoquímica e fotocrômica. Estudos prévios de difração de raios-X e nêutrons em amostras policristalinas descrevem a estrutura do HPW hexahidratado ($\text{HPW} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) e a natureza das espécies protônicas presentes, assim como mudanças estruturais induzidas pela variação de temperatura (1, 2). Nesses estudos foi identificada uma transição de fase não-convergente por volta de 320K, que ocorre devido a dois processos dependentes da temperatura: (i) mudanças no equilíbrio das espécies protônicas e (ii) contração dos tetraedros PO_4 do HPW. O objetivo deste estudo é a caracterização do ambiente químico do HPW e do equilíbrio dinâmico das espécies de prótons, correlacionando as interações que ocorrem entre o polianion e as estruturas que contém os prótons. Os experimentos de ^{31}P -RMN mostram as mudanças no tetraedro PO_4 , por volta de 320K. Por outro lado experimentos de ^1H -RMN mostram a mudança no equilíbrio entre as espécies protônicas na mesma temperatura, entretanto este processo não é reversível, como relatado nas Ref. 1 e 2. Para o $\text{HPW} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, ao contrário do que ocorre com o $\text{HPW} \cdot n\text{H}_2\text{O}$, foi possível a obtenção de sinal em Experimentos de polarização cruzada (CP) $\{^1\text{H}\}-^{31}\text{P}$ RMN, revelando que o polianion está em um estado de menor mobilidade. Estes experimentos revelam um acoplamento fraco entre núcleos de ^1H e ^{31}P , como esperado, considerando as distâncias nucleares envolvidas (~6 Å). Experimentos de ressonância dupla de eco de spin (SEDOR) $\{^1\text{H}\}-^{31}\text{P}$ mostraram que as espécies ^{31}P estão conectadas com dois diferentes ambientes protônicos, o que resulta em um decaimento do eco com duas constantes temporais. Esta heterogeneidade poderia corresponder a vacâncias de sítios H^+ em alguns pontos do cristal. Esperam-se encontrar mais resultados para correlacionar as interações entre o polianion e as espécies protônicas através de experimentos de correlação heteronuclear, identificando a natureza da heterogeneidade observada em SEDOR.

Palavras-chave: Ácido tungstofosfórico. Keggin. RMN.

Referências

- 1 KREMENOVIC, A.; SPASOJEVIC-DE BIRÉ, A.; DIMITRIJEVIC R.; SCIAU, P.; MIOC, U.B.; COLOMBAN, Ph. Keggin's ion structural modification and expansion of dodecatungstophosphoric acid hexahydrate induced by temperature treatment: In situ X-ray powder diffraction and raman investigations **Solid State Ionics**, v. 132, n. 1-2, p. 39-53, 2000.
- 2 KREMENOVIC, A.; SPASOJEVIC-DE BIRÉ, A.; F BOURÉE; COLOMBAN, Ph.; DIMITRIJEVIC, D. M.; MIOC, U.B. Structural modifications of dodecatungstophosphoric acid hexahydrate induced by temperature in the 10–358 K range. In situ high-resolution neutron powder diffraction investigation **Solid State Ionics**, v. 150, n. 3-4, p. 431-442, 2002.

PG-140B - Chemical environments of tungstophosphoric acid hexahydrate studied by NMR

OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de Oliveira¹; SCHNEIDER, José Fabian¹

mjunior@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Keggin type heteropolyacids, like tungstophosphoric acid (HPW), have several applications due to their physical properties, like photochemical and photochromic response. Previous studies of x-ray and neutrons powder diffraction have described the structure of the HPW hexahydrate (HPW·6H₂O) and the nature of protonic species, as well as structural changes induced by temperature (1, 2). They have identified a non-convergent phase transition at 320K, which occurs due to two interconnected temperature-dependent processes: (i) changes in the equilibrium of protonic species and (ii) shrinking of the PO₄ tetrahedra of HPW. The relation between these two processes is not well-known. The aim of this study is to characterize the HPW environment and the dynamic equilibrium of protonic species using nuclear magnetic resonance (NMR), correlating the interactions between the polyanions and the protonic species. The ³¹P-NMR experiments showed the changes in the PO₄ tetrahedra induced by temperature near 320K. On the other hand ¹H-NMR experiments showed the changing in the protonic species equilibrium in the same temperature region, but this process is not as reversible as demonstrated by Ref 1,2. {¹H}-³¹P cross polarization (CP) NMR experiments have already been tested in the HPW·nH₂O, but without success due to the high mobility of the HPW polyanion. In the HPW·6H₂O it were possible to realize such experiments, revealing that the polyanion is in a less mobile condition. These experiments revealed a weak dipolar coupling between 1H and 31P, due to the distances between these nuclei in the HPW·6H₂O (~6 Å). {¹H}-³¹P Spin echo double resonance (SEDR) experiments in low temperature show that the 31P species are connected with two different protonic environments, yielding in an echo decay with two different constant times. This heterogeneity can be due to vacancies of H⁺ species in some points of the crystal. We hope to find more correlation between the protonic species and the polyanion trough heteronuclear correlation experiments, identifying the nature of the heterogeneity observed in SEDOR.

Keywords: Tungstophosphoric acid. NMR. Keggin.

Referências

1 KREMENOVIC, A.; SPASOJEVIC-DE BIRÉ, A.; DIMITRIJEVIC R.; SCIAU, P.; MIOC, U.B.; COLOMBAN, Ph. Keggin's ion structural modification and expansion of dodecatungstophosphoric acid hexahydrate induced by temperature treatment: in situ x-ray powder diffraction and raman investigations. **Solid State Ionics**, v. 132, n. 1-2, p. 39-53, 2000.

2 KREMENOVIC, A.; SPASOJEVIC-DE BIRÉ, A.; F BOURÉE; COLOMBAN, Ph.; DIMITRIJEVIC, D. M.; MIOC, U.B. Structural modifications of dodecatungstophosphoric acid hexahydrate induced by temperature in the 10–358 K range. In situ high-resolution neutron powder diffraction investigation **Solid State Ionics**, v. 150, n. 3-4, p. 431-442, 2002.

PG-141A - Obtenção de materiais luminescentes via incorporação de complexos de európio em matrizes híbridas mesoporosas

BOTELHO, Moema¹; QUEIROZ, Thiago B. de¹; GALVEZ, Maria Dolores¹; COLA, L. de²; ECKERT, Hellmut²; BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo Alvarez¹
moemabotelho@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Westfälisches Wilhelms Universität Münster

Complexos luminescentes de lantanídeos incorporados em diferentes matrizes sólidas têm sido considerados materiais promissores em dispositivos eletroópticos e em bioanálise, uma vez que estes materiais apresentam maior estabilidade térmica, mecânica, e fotosensitiva. Para tais aplicações, é importante o estudo das propriedades luminescentes destes complexos em solução e após incorporação nos sólidos. Contudo, atenção especial deve ser dada ao processo de liberação da espécie ativa, especialmente quando se almeja aplicações biológicas. Neste trabalho, apresentamos a síntese de um novo complexo de európio fenil-bipiridina carboxil e sua caracterização fotofísica, tanto em solução quanto incorporado em matrizes silicatos híbridas, preparadas através da metodologia sol-gel. Para assegurar a permanência do complexo no interior da matriz mesmo quando esta é exposta a meios líquidos, propomos interações não covalentes, do tipo π - π e σ - π , entre os anéis aromáticos do complexo e os sítios orgânicos presentes na superfície das matrizes, como grupos fenil e etil. A análise estrutural dos xerogéis utilizados como matrizes hospedeiras foi realizada através de experimentos de SAXs, sorção de nitrogênio, FTIR e ressonância magnética nuclear em estado sólido dos núcleos ^{13}C , ^{29}Si e ^1H . As propriedades luminescentes do complexo foram analisadas em termos dos diferentes ambientes químicos do íon (Eu^{3+}). Realizamos também um estudo sistemático da liberação do complexo mediante exposição a solventes orgânicos. Os resultados indicaram que esses materiais são promissores candidatos no desenvolvimento de novos dispositivos ópticos, inclusive apresentando maiores tempos de vida do estado excitado (até 2.1 ms) quando comparados com o complexo em solução (em torno de 1.6 ms).

Palavras-chave: Complexo Európio(III). Luminescência. Sol-gel.

PG-141B - Alternative approaches for the encapsulation of luminescent europium complexes in hybrid mesoporous hosts towards new optical materials

BOTELHO, Moema¹; QUEIROZ, Thiago B. de¹; GALVEZ, Maria Dolores¹; COLA, L. de²; ECKERT, Hellmut²; BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo Alvarez¹

moemabotelho@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Westfälisches Wilhelms Universität Münster

The study of the luminescent properties of lanthanide complexes incorporated in different solid hosts is motivated by the possibility of application of the resulting materials in a large range of optoelectronic devices and bioanalytical systems. The encapsulation of the light-emitting species in the solid leads to more robust and durable materials but preventive measurements should be taken to avoid leakage of the active species, especially for biological applications. In this work, we present the synthesis of three new bipyridine carboxylate Eu⁺³ complexes and their photophysical characterization in solution and while incorporated in hybrid (organic-inorganic) silicate host matrices, prepared by the sol gel methodology. The results are analyzed in terms of the different chemical environments provided by the hosts to the Eu-complexes, which imply in differences in photophysical behaviors. To ensure firm attachment of the complexes to the host, we propose pi-pi or sigma-pi interactions between the aromatic rings of the complexes and the organic sites located at the matrices, and a study of release when the system is exposed to liquid medium, is presented. Besides the photophysical studies, xerogels and ordered mesoporous silicates, used as hosts, were characterized by standard structural techniques (SAXs, nitrogen sorption, FT-IR) and by solid state Nuclear Magnetic Resonance of the constituent nuclei ¹³C, ²⁹Si and ¹H. The results indicate very promising materials with successful immobilization of the complexes which present lifetimes of the excited state ⁵D₀ of Europium up to 2.1 ms.

Keywords: Europium(III) complex. Luminescence. Sol-gel.

PG-142A - Imunossensores baseados em guias de onda planares para o diagnóstico de doenças negligenciadas

VIEIRA, Nirton Cristi Silva¹; ZUCOLOTTO, Valtencir¹; GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo¹

nirton@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O desenvolvimento de métodos diagnósticos e a procura de novos fármacos no que se refere á doenças negligenciadas são de grande interesse, visto que milhões de pessoas em diversos países sofrem destes males, que ainda se mostram sem diagnóstico e tratamento eficientes (1). Visando a alteração deste quadro, propomos o desenvolvimento de um sensor capaz de diagnosticar algumas destas doenças, por exemplo dengue e Doença de Chagas. Resultados preliminares obtidos em nosso grupo indicaram que a luz confinada em guias de ondas planares à base materiais luminescentes, como alumina porosa e polímeros conjugados dispersos em uma matriz acrílica, sofrem forte interação com a cavidade óptica e o meio em que ela está inserida (2, 3). A luz emitida pelo guia de onda é composta de modos de propagação estreitos espectralmente que são extremamente sensíveis às mudanças das condições de contorno da cavidade, ou seja, à presença de materiais quando confinados dentro dos poros ou mesmo sobre a sua superfície. Assim, na presente atividade serão utilizados guias de onda planares orgânicos e inorgânicos como substrato para a imobilização de anticorpos específicos aos抗ígenos das doenças de interesse e sensoriamento. Desta forma, propõem-se o estudo destes materiais e sua utilização como imunosensores ópticos (4). Apesar da enorme versatilidade para aplicações como sensores, alguns aspectos fundamentais relacionados à preparação e à física por trás da construção e aplicação destas estruturas como dispositivos sensores ainda representa um grande desafio.

Palavras-chave: Imunossensor. Guia de Onda. Doenças negligenciadas.

Referências

- 1 WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Tropical diseases.** Disponível em: <http://www.who.int/topics/tropical_diseases/en/>. Acesso em 13 Ago. 2011.
- 2 VALE, M. M. **Guias de onda poliméricos para sensoriamento óptico e conversão de comprimentos de onda.** 2010. 112 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- 3 STRIXINO, F. T.; GUIMARÃES, F. E. G. Active waveguide effects from porous anodic alumina: an optical sensor proposition. **Applied Physics Letters**, v. 97, n. 011902, p.1-3, 2010.
- 4 LUPPA, P. B.; SOKOLL, L. J.; CHAN, D. W. Immunosensors: principles and applications to clinical chemistry. **Clinica Chimica Acta**, v. 314 , n. 1-2, p. 1–26, 2001.

PG-143A - Estudo espectroscópico da dinâmica molecular e empacotamento em semicondutores orgânicos

BERNARDINELLI, O. D.¹; AZEVEDO, E. R.¹

oigres@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Estudamos a dinâmica molecular e o empacotamento em semicondutores orgânicos usando várias técnicas, em particular RMN, WAXS, DSC, espectroscopia Raman, absorção UV-Vis e fluorescência. Os sistemas estudados foram oligômeros de fluorenos com 3, 5 e 7 unidades repetitivas e copolímeros multi-blocos conjugados/não-conjugados com as unidades conjugadas constituídas por unidades de fenileno vinílico (PV) e as não conjugadas por espaçadores alifáticos. No caso dos oligômeros, foi encontrado que o ordenamento das cadeias depende do número de unidades repetitivas, com o pentâmero possuindo uma tendência muito maior de cristalização. Isto foi suportado por cálculos teóricos ab-initio e confirmado pelos estudos sobre a dinâmica molecular das cadeias dos oligômeros. No estudo referente aos copolímeros em bloco, a presença do grupo espaçador alifático inibe a forte tendência de cristalização das unidades de PV, porém não impedem a agregação. Encontramos ainda que dispersão de tamanhos das unidades agregadas afeta as características de emissão dos copolímeros de modo que a emissão nas cadeias maiores seja privilegiada. A respeito da dinâmica molecular, a presença de movimentos na região do espaçador alifático contribui tanto para o aparecimento de processos de relaxação não radiativos como para o alargamento das bandas vibrônicas.. Portanto, mesmo em sistemas com comprimento de cadeias muito bem controlados, as fortes interações intermoleculares, podem tornar a morfologia em estado sólido bastante complexa, sendo que muitas das propriedades ópticas são afetadas pela forma de empacotamento, desordem conformacional e térmica, além da própria constituição das cadeias.

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear. Biomassa. Caracterização.

Referências

1 BERNARDINELLI, O.D. **Estudo espectroscópico da dinâmica molecular e empacotamento em semicondutores orgânicos**. 2011. 148 p. Dissertação (Mestrado em Física Básica) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

PG-144A - Utilização de ressonância quadrupolar nuclear para o estudo de materiais com técnicas uni- e bidimensionais e implementação de informação quântica

POLLI, Roberson Saraiva¹; OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo de¹; VIDOTO, Edson Luiz Gea¹; AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de¹; OLIVEIRA, Everton Lucas de¹; PINTO, Diogo de Oliveira Soares¹; TELES, João²; BONAGAMBA, Tito José¹

roberson@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Centro de Ciências Agrárias - Universidade Federal de São Carlos - Campus Araras

A ressonância quadrupolar nuclear (RQN) é uma técnica espectroscópica correlata à ressonância magnética nuclear (RMN), que pode ser usada para detectar sinais em substâncias que contém núcleos com spin nucleares maiores que 1/2. Ao contrário da RMN, a RQN, a princípio, não necessita de campos magnéticos, apenas em casos onde é necessário desdobrar os níveis de energia do núcleo, com a aplicação de campos da ordem de Gauss (G). Assim, a RQN se torna uma técnica analítica atraente sendo considerada de baixíssimo custo, quando comparada à RMN para a caracterização estrutural de vários compostos com técnicas uni- e bidimensionais e implementação de ferramentas para informação quântica (IQ). O objetivo deste trabalho visa à implementação da técnica de RQN, através da: i) montagem de um espectrômetro, utilizando a infraestrutura já existente em nossos laboratórios, ii) o desenvolvimento de sondas, iii) o desenvolvimento de metodologias de RQN para o estudo de materiais e implementação de ferramentas de IQ. No âmbito de IQ, desenvolvemos um porta amostra com três graus de liberdade para encontrar a correta direção do gradiente de campo elétrico da amostra (um cristal de KClO₃) em relação ao campo magnético externo perturbativo, campo este da ordem de G e proveniente de um magneto Oxford de 2T. O conhecimento deste dado torna possível a implementação de portas lógicas simples e inclusive preparação de estados pseudopuros. As portas lógicas CNOTa e CNOTb já foram otimizadas numericamente através do método SMP (do inglês strong modulated pulses) e serão em breve implementadas. Paralelamente, está em fase inicial de construção uma sonda específica para estudo de fármacos, visando de início a avaliação de possíveis polimorfismos em amostras de diclofenaco sódico.

Palavras-chave: RQN. Informação quântica. Cristal sólido.

Referências

- 1 TELES, J.; DEAZEVEDO, E. R.; AUCCAISE, R.; SARTHOUR, R.S.; OLIVEIRA, I. S.; BONAGAMBA, T. J. Quantum state tomography for quadrupolar nuclei using global rotations of the spin system. **Journal of Chemical Physics**, v. 126, n. 15, p.154506,2007. DOI: 10.1063/1.2717179.
- 2 BAIN, A.; KHASAWNEH, M. From NQR to NMR: the complete range of quadrupole interactions. **Concepts in Magnetic Resonance**, v. 22A, n.2, p.69-78, 2004.

3 BALCHIN, E.; MALCOLME-LAWES, D. J.; POPLETT, I. J. F.; ROWE, M. D.; SMITH, J. A. S.; PEARCE, G. E. S.; WREN, S. A. C. Potential of nuclear quadrupole resonance in pharmaceutical analysis. **Analytical Chemistry**, v. 77, n.13, p. 3925-30, 2005. DOI: 10.1021/ac0503658.

PG-145A - Ecos de múltiplo-quantum e seleção de coerências no GdAl₂ utilizando RMN em campo-zero

OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo de¹; TELES, João²; RIVERA-ASCONA, Christian¹; TOZONI, José Roberto³; VIDOTO, Edson Luiz Géa¹; BONAGAMBA, Tito José¹

rsilv@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Centro de Ciências Agrárias - Universidade Federal de São Carlos

³ Instituto de Física - Universidade Federal de Uberlândia

Os experimentos em materiais magnéticos utilizando Ressonância Magnética Nuclear (RMN) em campo-zero, são uma fonte de informação a respeito do ambiente nuclear, perturbada pelas interações hiperfinas entre diferentes núcleos e elétrons na sua vizinhança. Com um experimento de dois pulsos de radiofrequência (RF), fazemos dois tipos básicos de experimentos para obter o espectro em banda larga e o padrão de oscilações quadrupolares para a amostra de GdAl₂. Com estes experimentos observamos a formação dos sinais do FID (Free Induction Decai) e os cinco ecos de multiplo-quantum. Vimos que os espectros e oscilações quadrupolares apresentam resultados que corroboram um ao outro. Para se observar cada coerência individualmente sem sobreposição e aumentar a relação sinal/ruído, implementamos a seleção de coerências pela ciclagem de fase dos dois pulsos de RF. Os resultados indicam que a seleção de coerência foi bem sucedida, indicando que a i-ésima ordem de coerência contribui somente para a formação do i-ésimo eco. Há indicações da aplicabilidade para outros materiais magnéticos, tais como, manganitas e FeV, que é o benefício desta metodologia de estudo.

Palavras-chave: RMN em campo-zero. Seleção de coerência. GdAl₂.

Referências

- 1 Lord, J.S.; Riedi, P.C. A swept frequency pulsed magnetic resonance spectrometer with particular application to NMR of ferromagnetic materials. **Measurement Science & Technology**, v. 6, n. 2, p. 149-155, 1995.
- 2 ABE, H.; YASUOKA, H.; HIRAI, A. Spin echo modulation caused by the quadrupole interaction and multiple spin echoes. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 21, n. 1, p. 77-88, 1966.
- 3 BAUER, M.; DORMANN, E. Origin of zero-field ²⁷Al NMR spectra of ferromagnetically ordered GdAl₂. **Physics Letters A**, v. 146, n. 1-2, p. 55-59, 1990.
- 4 BUTTERWORTH, J. Spin echoes in solids. **Proceedings of the Physical Society of London**, v. 86, p. 297-304, 1965.
- 5 GOLUB, V. O.; KOTOV, V. V.; PODYELETS, Y. A.; POGORELY, A. N. Nuclear spin echo in magnetics with inhomogeneous hyperfine and quadrupole interaction. **Hyperfine Interactions**, v. 59, n.1-4, p. 293-296, 1990.

PG-146A - Montagem e caracterização de um laser de Cr: LiCAF para microscopia de fluorescência por dois fótons

PRATAVIEIRA, Sebastião¹; BAGNATO, Vanderlei Salvador¹; MISOGUTI, Lino¹

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Na área de biologia e medicina um preciso diagnóstico das condições de um tecido e/ou órgão é fundamental, tanto para avaliar a presença de neoplasias e outras alterações teciduais, quanto para avaliar a resposta do organismo durante um tratamento. O uso de técnicas de óptica não linear, tais como fluorescência devido à absorção de dois fótons, são recursos mais avançados que podem ajudar a superar algumas limitações das técnicas atuais, como por exemplo, obtermos imagens com maior resolução espacial e com uma profundidade de investigação na amostra até três vezes maior (1). Este projeto tem por objetivo desenvolver um microscópio óptico não linear, para adquirir imagens de fluorescência devido à absorção de dois fótons em tecidos e órgãos, visando obter imagens *in vivo* tridimensionais com resolução celular. A construção envolve tanto a montagem de um sistema laser de femtossegundo alternativo ao laser de Titânio-Safira, quanto à montagem do sistema de microscopia por dois fótons. A parte inicial do projeto contemplou um estudo detalhado dos fundamentos físicos envolvidos em um laser de femtossegundo, assim como de um sistema de microscopia. A escolha da montagem de um laser de femtossegundo de Cr³⁺: LiCAF é justificada pela busca por uma alternativa mais economicamente viável em um potencial uso clínico da microscopia por absorção de dois fótons (2). Os componentes ópticos e eletrônicos foram definidos, alguns já adquiridos, outros em fase de importação. Alguns componentes ópticos e mecânicos foram desenhados e fabricados por encomenda. Neste trabalho são apresentados essencialmente os fundamentos teóricos do laser de femtossegundo e do microscópio e a caracterização dos componentes disponíveis até o momento. Por exemplo, a medida da potência e do fator M² dos lasers de bombeio, espectro de absorção dos cristais, etc.

Palavras-chave: Laser femtossegundo. Absorção de dois fótons. Microscopia de fluorescência.

Referências:

1 DENK, W. ; STRICKLER, J. H.; WEBB, W. W. 2-Photon laser scanning fluorescence microscopy. **Science**, v. 248, n.4951, p.73-76, 1990.

2 SAKADZIC, S; DEMIRBAS, U; MEMPEL, T. R.; MOORE, A.; RUVINSKAYA, S.; BOAS, D. A.; SENNAROGLU, A.; KARTNER, F. X.; FUJIMOTO, G. Multi-photon microscopy with a low-cost and highly efficient Cr:LiCAF laser. **Optics Express**, v.16, n.25, p.20848-20863,2008.

PG-147A - Propriedades elétricas de compósito cerâmico de BaZr_{0,15}Ti_{0,75}O₃ - Ba_{0,77}Ca_{0,23}TiO₃

AMARAL, Thiago Martins¹; GUALBERTO, Alan Rodrigo Marinho¹; ANTONELLI, Eduardo²; HERNANDES, Antonio Carlos¹

thimaral@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Ciência e Tecnologia - Universidade Federal de São Paulo

O titanato de bário (BaTiO₃) é um material funcional bastante conhecido e utilizado por suas propriedades piezoelétricas, ferroelétricas e alta constante dielétrica. Estas propriedades fazem com que ele possibilite miniaturização e aumento da capacidade de acúmulo de carga de capacitores (1). A transição de ferroelétrico/paraelétrico do BaTiO₃ ocorre em torno de 120°C e é característico que esta transição seja acompanhada de um pico de constante dielétrica. No entanto, este pico ocorre em um intervalo estreito de temperatura, reduzindo a região térmica de ótimo funcionamento de componentes elétricos a base de BaTiO₃. Como a temperatura da transição ferroelétrico/paraelétrico pode ser alterada por dopantes (e.g. Zr, Ca), o máximo de constante dielétrica também pode ser alterado (2). O objetivo deste trabalho é produzir e caracterizar eletricamente cerâmicas mistas de BaZr_{0,15}Ti_{0,75}O₃ com Ba_{0,77}Ca_{0,23}TiO₃ -(compostos com diferentes temperaturas de transições ferroelétrico/paraelétrico) visando um compósito com extendido intervalo de temperatura no qual a constante dielétrica seja alta. Os pós utilizados foram produzidos por síntese no estado sólido e suas fases analisadas por difração de raios-x. As pastilhas foram obtidas por prensagem uniaxial formando uma cerâmica com dupla camada, uma camada de BaZr_{0,15}Ti_{0,75}O₃ sobre uma camada de Ba_{0,77}Ca_{0,23}TiO₃ e então prensadas isostaticamente. A sinterização das amostras foi realizada em forno convencional e as propriedades elétricas destas amostras mistas comparadas às de amostras homogêneas. A concretização dos nossos objetivos expandiria o intervalo de temperatura de ótimo funcionamento de componentes eletrônicos a base dos compostos utilizados.

Palavras-chave: Ferroelétricos. Titanato de bário. Propriedades dielétricas.

Referências

1 HAERTLING, G.H. Ferroelectric ceramics: history and technology. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 82, n. 4, p 739-818, 1999.

2 JAFFE, B.; COOK, W. R.; JAFFE, H. **Piezoelectric ceramics**. New York: Academic Press, 1971.

PG-148A - Desenvolvimento de técnicas de precessão livre no estado estacionário (SSFP) com alternância de fase para aquisição rápida de espectros de RMN em alta resolução

MORAES, Tiago Bueno de¹; COLNAGO, Luiz Alberto¹

tiagobuemoraes@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Recentemente demonstramos que a precessão livre no estado estacionário (SSFP) pode ser usada para melhorar a S/R em pelo menos 5 vezes em experimentos de RMN em alta resolução quando comparada com as técnicas convencionais. Como nas seqüências SSFP não há dependência do valor do tempo de relaxação longitudinal (T_1), pode-se promediar até milhares de espectros por segundo. No entanto, esse tipo de experimento leva a introdução de anomalias de fase e amplitude. As soluções apresentadas até agora não foram adotas pelos espectroscopistas de RMN por não serem de uso geral ou não proporcionar um grande aumento da S/R. No projeto de mestrado Tiago B. Moraes analisou-se as vantagens e desvantagens da utilização do método da diagonalização filtrada (FDM – do inglês, Filter Diagonalization Method) para obtenção de espectros SSFP sem as distorções de fase e amplitude. Foi mostrado que com a utilização do FDM pode-se obter espectros mais rapidamente com excelente relação sinal/ruído, entretanto o FDM apresenta limitações quando lida com sinais ruidosos e com alta concentração de picos. Assim, o objetivo deste projeto será avaliar detalhadamente as seqüências de pulsos SSFP convencional e SSFP com alternância de fase para obtenção de espectros de RMN de ^{13}C e outros isótopos de baixa abundância natural. Com essas técnicas espera-se suprimir a componente eco do sinal SSFP e consequentemente a supressão de sinais no espectro no domínio da frequência. Serão avaliadas as seqüências com alternância de fase CP90 (X-X) e CPMG90 (Y-Y) e também outros ciclos de fase. Além disso, pretende-se usar e aperfeiçoar o método FDM para processamento de sinal de RMN-SSFP para levar as distorções espetrais causadas pela Transformada de Fourier.

Palavras-chave: RMN. FDM. SSFP.

Referências

- 1 AZEREDO, R. B. de V.; COLNAGO, L.A.; ENGELBERG, M. Quantitative analysis using steady-state free precession nuclear magnetic resonance. *Analytical Chemistry*, v.72, n.11, p. 2401- 2405, 2000. DOI: 10.1021/ac991258e.
- 2 MORAES, T. B. **O método da diagonalização filtrada (FDM) e suas aplicações para a ressonância magnética.** 2011. 98 p. Dissertação (Mestrado em Ciências - opção: Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.
- 3 ANDRADE, F. D. **Desenvolvimento de sequências de pulso de eco de spin de baixa potência para RMN on-line.** 2011. 94 p. Tese (Doutorado em Ciências - opção: Química Analítica) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

PG-149A - Estudo dos transistores de efeito de campo orgânicos

SOUSA, Washington da Silva¹; MACIEL, Alexandre de Castro¹; FARIA, Roberto Mendonça¹
wssousa@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nas últimas décadas os polímeros conjugados vêm sendo aplicados numa grande variedade de aplicações tecnológicas tal como organic light-emitting diodes (OLEDs) (1) e organic thin film transistor (OTFTs) (2). Para o melhor desempenho dos OTFTs é necessário entender as características elétricas, térmicas e mecânicas de cada camada individual e da interface camada ativas e a dielétrica. A interface entre o dielétrico e a camada ativa do transistor desempenha um papel fundamental no desempenho do dispositivo. Por isso utilizaremos a técnica corona dentre outra para modificar esta superfície. Os polímeros dielétricos a serem utilizados são PMMA, PS e ionômeros de poliestireno sulfonado com lítio ou potássio e na camada ativa do dispositivo utilizaremos o P3HT. Os primeiros dispositivos fabricados foram constituídos por uma camada dielétrica de PS e uma camada ativa de P3HT. Estes dispositivos foram fabricados com uma estrutura denominada de top-gate, mas pretendemos utilizar outras arquiteturas. Os filmes foram obtidos utilizando a técnica de spincoating e os contatos elétricos foram obtidos por evaporação térmica de ouro para a fonte e o dreno e alumínio para o eletrodo da porta. Estes transistores mostraram uma mobilidade e razão on/off de aproximadamente 0,01 cm²/Vs e 170, respectivamente.

Palavras-chave: OTFT. PS. P3HT.

Referências

- 1 KALINOWSKI, D. Electroluminescence in organics. **Journal of physics D- Applied Physics**, v. 32, n. 24, p. R179-R249, 1999.
- 2 HOROWITZ, G. Organic thin film transistor: from theory to real devices. **Journal of Materials Research**, v. 19, n. 7, p. 1946-1962, 2004.

PG-150A - Estudos cristalográficos e funcionais do hPPAR α LBD em complexo com ligantes naturais e sintéticos

BERNARDES, Amanda¹; MUNIZ, João Renato Carvalho²; GODOY, André S.¹; POLIKARPOV, Igor¹
abernardes@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Consórcio Estrutural Genômico - Universidade de Oxford

Os receptores ativadores da proliferação de peroxissomos (PPARs) são membros da superfamília de receptores nucleares, possuindo três subtipos que são codificadas por genes diferentes: PPAR α , PPAR β/δ , e PPAR γ , cada um apresentando especificidade de ligação e expressão tecidual distintas. Os PPARs estão envolvidos em várias funções fisiológicas, principalmente no metabolismo de lipídeos e glicose. Quando ativados apresentam eficiência no tratamento de dislipidemia, inflamação e aterosclerose. A regulação dessas importantes funções através da interação com ligantes tornam esses receptores alvos para o desenvolvimento de fármacos em muitas áreas terapêuticas (1). Os ligantes podem ser classificados em compostos sintéticos, como os fibratos e as tiazolidinedionas e, em ligantes naturais como ácidos graxos. Entretanto, enquanto ligantes seletivos estão sendo desenvolvidos, ainda não é conhecido se os ligantes endógenos possuem seletividade *in vivo* (2). Neste trabalho apresentamos estruturas cristalográficas do domínio de ligação ao ligante (LBD) do PPAR α complexado a diferentes ligantes, dentre eles um agonista potente do PPAR α e amplamente utilizado, WY14643. Outra estrutura de alta resolução obtida foi do complexo do PPAR α com ácidos graxos, importantes ligantes naturais. As estruturas foram refinadas e mostraram claramente densidades eletrônicas dos ligantes no interior do sítio ativo, interagindo diretamente com a hélice doze, que obriga a proteína a adotar a conformação ativa. Nas duas estruturas uma segunda molécula de ligante foi observada em diferentes posições. Ensaios biofísicos e de transativação de gene repórter foram usados para confirmar a ligação e ativação da proteína. Esses estudos estruturais nos permitiu identificar os principais resíduos no reconhecimento dos ligantes e nos forneceu conhecimento sobre fatores determinantes na seletividade gerada entre os subtipos. Além disso, alguns ensaios de análise de estabilidade proteica tem proporcionado a oportunidade de identificar novos ligantes.

Palavras-chave: Receptor nuclear. Estudos cristalográficos. Ligantes.

Referências

- 1 MOORE, J. T.; COLLINS, J. L.; PEARCE, K. H. The nuclear receptor superfamily and drug discovery. **ChemMedChem**, v. 1, n. 5, p. 504-23, 2006.
- 2 WAKU, T.; SHIRAKI, T.; OYAMA, T.; FUJIMOTO, Y.; MAEBARA, K.; KAMIYA, N.; JINGAMI, H.; MORIKAWA, K. Structural insight into PPAR γ activation through covalent modification with endogenous fatty acids. **Journal of Molecular Biology**, v. 385, n. 1, p. 188-99, 2009.

PG-151A - Avaliação da formação de agregados e estudos estruturais de septinas de *Schistosoma mansoni*

ZERAIK, Ana Eliza¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian de¹; DE MARCO, Ricardo¹

anaeliza@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Septinas pertencem à super família das GTPases, são evolutivamente conservadas e estão envolvidas em importantes processos celulares, como citocinese e exocitose. Além de estarem relacionadas com doenças neurológicas, como o mal de Alzheimer e Parkinson (1). Este trabalho tem como foco duas septinas de *Schistosoma mansoni*, (o agente etiológico da esquistossomose na América do Sul) (2) denominadas Smsept5 e Smsept10, que foram produzidas em sistema heterólogo. O objetivo do presente estudo foi avaliar se estas septinas, pertencentes a um organismo mais simples, apresentavam características semelhantes às septinas humanas. A análise da estrutura protéica, por Dicroísmo Circular, mostrou que ambas as proteínas produzidas se encontravam enoveladas. O teste para avaliação da atividade GTPase mostrou que Smsept5 era capaz de hidrolisar GTP, enquanto Smsept10 não, mesmo após 24 h de incubação com o nucleotídeo. Através de ensaios de espalhamento de luz a um ângulo fixo em crescentes temperaturas, foi possível verificar a formação de agregados proteicos, indicando que a agregação das proteínas estudadas é estimulada por altas temperaturas. O aumento no espalhamento de luz foi acompanhado por um aumento na emissão de fluoescência da sonda Thioflavina T (utilizada para monitorar a formação de fibras do tipo β -amilóide), o que sugere que os agregados observados eram do tipo β -amilóide. Por meio das técnicas utilizadas neste trabalho, foi possível concluir que as duas septinas de *S. mansoni* foram produzidas de forma enovelada e ativa, e que possuem conformações sensíveis à temperatura. Smsept5 começa a agregar em temperaturas acima de 30 °C e Smsept10 em temperaturas acima de 37 °C. Os experimentos com ThT sugerem que estes agregados são organizados na forma de fibras β -amilóides, resultados que concordam com aqueles descritos para septinas humanas. O que sugere que as septinas de *S. mansoni* podem desempenhar um papel semelhante àquele descrito em humanos.

Palavras-chave: Septinas. *Schistosoma mansoni*. Fibras β -amilóides.

Referências

1 WEIRICH, C. S.; ERZBERGER, J. P.; BARRAL, Y. The septin family of GTPases: architecture and dynamics. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 9, n. 6, p. 478-489, 2008.

2 BERRIMAN, M. et al. The genome of the blood fluke *Schistosoma mansoni*. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 352-360, 2009.

PG-151B - Conformational and aggregation studies of *Schistosoma mansoni* septins

ZERAIK, Ana Eliza¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian de¹; DE MARCO, Ricardo¹
aeliza@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Septins are an evolutionarily conserved family of GTP-binding proteins involved in important cellular processes, such as cytokinesis and exocytosis, and have been implicated in neurological diseases, such as Alzheimer's and Parkinson's diseases (1). The focus of this study was two septins of *Schistosoma mansoni*, (the causative agent of Schistosomiasis in South America) (2) named Smsept5 and Smsept10, which were produced in a recombinant system. Our objective was to verify if these septins from a simpler organism display similar characteristics to human septins. Analysis of protein structure by Circular Dichroism showed that both recombinant SmSeptins produced were folded. The GTPase activity assay showed that Smsept5 was able to hydrolyze GTP, whereas Smsept10 was not. Aggregation studies for amyloid fibril detection by right angle light scattering and Thioflavin T fluorescence assay were performed. Both proteins showed a temperature dependent increase in light scattering and fluorescence emission of ThT probe. This indicated that *S. mansoni* septins tend to aggregate into amyloid-like fibers in high temperatures, with thresholds of 30 °C for Smsept5 and 37 °C for Smsept10. These results are in accordance to that previously reported for human septins.

Keywords: Septins. *Schistosoma mansoni*. Amyloid-like fibers.

Referências

- 1 WEIRICH, C. S.; ERZBERGER, J. P.; BARRAL, Y. The septin family of GTPases: architecture and dynamics. **Nature Reviews Molecular Cell Biology**, v. 9, n. 6, p. 478-489, 2008.
- 2 BERRIMAN, M. et al. The genome of the blood fluke *Schistosoma mansoni*. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 352-360, 2009.

PG-152A - Respiração do solo na cultura de cana-de açúcar segundo diferentes manejos

CARVALHO, Camila Miranda¹; MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira¹

camilamc.mila@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O manejo do solo é de suma importância na incorporação e degradação da matéria orgânica, e está fortemente relacionado à emissão de gases do efeito estufa e ao aquecimento global (1). Além da produção de CO₂ pelas raízes e ação dos microorganismos, temos o transporte do gás do interior do solo até a superfície, sendo esses processos influenciados pela temperatura e umidade do solo (2). O foco deste trabalho é observar o efeito da adição de resíduos as propriedades do solo como umidade, temperatura e a emissão de CO₂ nos atuais sistemas de manejo da cultura de cana-de-açúcar. O experimento foi feito após nove meses de colheita da cana e aproximadamente 25 dias depois do plantio novo, cana reformada, sendo as medidas efetuadas por seis dias consecutivos. Os resultados mostram que as médias de emissão de CO₂, umidade e temperatura foram significativamente diferentes nos manejos de cana queimada e crua, com 5% de significância no ANOVA. Os dados apontam maior emissão de CO₂ e temperatura do solo na cana queimada, assim como o solo é mais úmido na cana crua. Este é um estudo preliminar, o qual requer mais análises para determinar qual dos dois sistemas de manejo tem maior contribuição para a diminuição do teor de matéria orgânica no solo.

Palavras-chave: Emissão de CO₂ do solo. Efeito estufa. Manejo da cana-de-açúcar.

Referências

1 LAL, R. Soil carbon sequestration impacts on global climate change and food security. *Science*, v. 304, p. 1623 - 1627, 2004.

2 REICOSKY, D.C.; LINDSTRON, M.J. Fall tillage method: effect on short-term carbon dioxide flux from soil. *Agronomy Journal*, n. 85, p. 1237-1243, 1993.

PG-153A - Cristalização, cocristalização, caracterização de estado sólido e avaliação de novos polimorfos de fármacos antineoplásicos

SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da¹; ELLENA, Javier¹

cecykarol@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Os insumos farmacêuticos ativos (IFAs), quando no estado sólido, podem apresentar diferentes formas que incluem polimorfos (IFAs com mesma fórmula química, mas diferente estrutura cristalina) e pseudopolimorfos (IFAs com moléculas – solventes, ácidos, bases, etc. – agregadas à sua rede cristalina) (1). A cada nova forma cristalina de determinado IFA estão associadas propriedades físico-químicas, tais como velocidade de dissolução e solubilidade, biodisponibilidade, bioequivalência, higroscopicidade, estabilidade física e química e manufaturabilidade, que podem diferir das apresentadas pelo IFA de referência. Isso traduz a obtenção de novas formas em possibilidades de manipulação da bio-eficácia dos fármacos, oferecendo aos cientistas farmacêuticos alternativas para o desenvolvimento de novos medicamentos (2). Assim, sob essa perspectiva, este projeto de pesquisa tem como objetivo cristalizar, cocristalizar e caracterizar as propriedades no estado sólido de novas formas cristalinas de fármacos antineoplásicos, com a finalidade principal de buscar possíveis formas farmacêuticas, que sejam alternativas desejáveis no tratamento do câncer. Após esta etapa, os compostos obtidos serão analisados com o uso de diferentes técnicas físicas de caracterização de estado sólido tais como microscopia ótica e eletrônica, difração de raios X por pó e por monocrystal, espectroscopia vibracional no infravermelho por transformada de Fourier e de RAMAN, análise termogravimétrica e calorimetria diferencial de varredura. Os resultados obtidos serão comparados com os dos IFAs de referência, incluindo, se possível, análises de bioequivalência farmacêutica.

Palavras-chave: Cristalização. Caracterização estrutural. Polimorfismo.

Referências

- 1 MCCRONE, W.C. Polymorphism In: FOX, D.; LABES, M.M.; WEISSBERGER, A. (Eds.). **Physics and chemistry of the organic solid state**. New York: Wiley-Interscience, 1965. v.2, p. 725–767.
- 2 BRITTAINE, H.G. (Ed). **Polymorphism in pharmaceutical solids**. 2. ed. New York: Marcel Dekker Inc., 1999, 448p. (Drugs and the Pharmaceutical Sciences. v.95).

PG-154A - Resposta fotodinâmica com pulsos ultracurtos

GRECCO, Clóvis¹; KURACHI, Cristina¹

clovis@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A Terapia fotodinâmica (TFD) é uma modalidade de tratamento local de câncer e outras neoplasias, oferecendo poucos efeitos colaterais em comparação com os tratamentos convencionais. A técnica se baseia na interação de uma fonte de luz com um agente fotossensibilizador (FS) e o oxigênio molecular presente na célula (1). Uma das limitações clínicas da técnica é a pouca penetração da luz no tecido biológico. Alguns autores, com o intuito de superar esta limitação, realizaram estudos utilizando fonte de luz pulsada, porém, os resultados reportados na literatura se mostraram inconclusivos (2,3). O objetivo deste presente estudo é investigar a resposta induzida pela terapia fotodinâmica utilizando fontes de luz pulsada, no regime de femtossegundos. Para isso, foram realizados ensaios *in vitro* e *in vivo* a fim de determinar o quanto eficiente o uso de fonte de luz pulsada, no regime de pulsos ultracurtos, em associação com fotossensibilizadores de primeira e segunda geração pode ser para promover um maior volume tecidual tratado quando comparado com fonte de luz em regime contínuo (CW). Nos estudos *in vitro*, foi observada a taxa de fotodegradação promovida pelo laser pulsado em comparação com o CW. A avaliação foi feita por meio do acompanhamento da emissão de fluorescência do agente FS, quando excitado com fonte de luz em 532 nm. A avaliação *in vivo* se deu pela análise quantitativa e qualitativa da necrose induzida via terapia fotodinâmica em tecido hepático, tendo como modelo, fígado sadio de ratos da linhagem Wistar. Como resultados preliminares, observamos que os fotossensibilizadores de primeira e segunda geração não respondem da mesma maneira quando irradiados com laser CW e pulsado. O laser pulsado apresentou maior taxa de fotodegradação do que o laser CW nos FS de primeira geração utilizado, enquanto para os fotossensibilizadores de segunda geração estudados, a taxa de fotodegradação é maior para o laser CW. Resposta semelhante foi observada nos estudos *in vivo*. Este estudo ainda não é conclusivo, exigindo a elaboração de novos experimentos para elucidar o que foi observado até o momento.

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Fotodegradação. Femtossegundos.

Referências

- 1 DOUGHERTY, T. J. Photodynamic therapy. **Photochemistry and Photobiology**, v. 58, n. 6, p. 895-900, 1993.
- 2 KAWAUCHI, S.; MORIMOTO, Y.; SATO, S.; ARAI, T.; SEGUCHI, K.; ASANUMA, H.; KIKUCHI, M. Differences between cytotoxicity in photodynamic therapy using a pulsed laser and a continuous wave laser: study of oxygen consumption and photobleaching. **Lasers in Medical Science**, v. 18, n. 4, p. 179-183, 2004.
- 3 OKUNAKA, T.; KATO, H.; KONAKA, C.; SAKAI, H.; KAWABE, H.; AIZAWA, K. A comparison between argon-dye and excimer-dye laser for photodynamic effect in transplanted mouse tumor. **Japanese Journal of Cancer Research**, v.83, n. 2, p. 226-231, 1992.

PG-155A - Análises do estado oligomérico e da massa molecular da seril tRNA sintetase de *Trypanosoma brucei* por cromatografia de exclusão molecular e espalhamento de luz dinâmico

MARTIL, D. E.¹; THIEMANN, O. H.¹

daiana Evelin@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O primeiro passo para a decodificação da mensagem genética é a ligação do aminoácido apropriado a um tRNA cognato. Esta ligação é catalisada por uma aminoacil tRNA sintetase (aaRS) que liga um aminoácido ao hidroxil 2' ou 3' livre da adenosa na extremidade 3' terminal da molécula de tRNA, por meio de uma reação dependente de ATP (1). As seril tRNA sintetas são membros da classe II das aaRSs, e jogam um papel adicional de aminoacilar o tRNASer e o tRNASEc com serina (2). A aminoacilação do tRNASEc é o primeiro passo da incorporação de selenocisteína (Sec) em proteínas. Sec é considerado o vigésimo primeiro aminoácido e, é responsável pela principal forma de incorporação de selênio. A enzima alvo de nosso estudo é a seril tRNA sintetase de *Trypanosoma brucei* (TbSerRS) que possui aproximadamente 54 KDa (monômero) e 470 resíduos de aminoácidos. TbSerRS foi purificada através da precipitação de sulfato de amônio e da cromatografia por afinidade. No processo de concentração da enzima foi utilizado um composto, disponível comercialmente como Nycomeden, a fim de estabilizarmos os estados oligoméricos existentes na amostra em estudo. A porcentagem deste foi determinada por meio da centrifugação por gradiente de densidade descontínuo. Os gráficos de calibração linear, parâmetro de partição (Kav) versus log (massa molecular) e versus raio de Stokes, foram obtidos através da cromatografia de exclusão molecular utilizando a coluna Superdex 200 10/300 GL (Amersham Pharmacia). Por meio destes, obtivemos a massa molecular e o raio de Stokes, referente ao Kav de 0.37, de aproximadamente 121 KDa e 4.2 nm respectivamente. Estes valores são referentes ao estado nativo, descrito na literatura como sendo um dímero em solução. Através do espalhamento de luz dinâmico, obtemos o raio hidrodinâmico de 4.6 nm, que corrobora com os dados obtidos pela cromatografia de exclusão molecular. De posse da enzima em seu estado nativo, estudos comparativos da TbSerRS nativa e ligada ao tRNASer e ao tRNASEc podem nos ajudar no entender o papel da mesma e de sua via metabólica, bem como os fatores de discriminação do tRNA.

Palavras-chave: Aminoacil tRNA sintetase. Seril tRNA sintetase. *Trypanosoma brucei*.

Referências

- 1) LODISH, H.; BERK, A.; MATSUDAIRA, P.; KAISER, C. A.; KRIEGER, M.; SCOTT. M. P. **Biologia celular e molecular**. 5a ed. Porto Alegre: ARTEMED, 2005. 1054 p.
- 2) ERIANI, G.; DELARUE, M.; POCH, O.; GANGLOFF, J.; MORAS, D. Partition of tRNA synthetases into two classes based on mutually exclusive sets of sequence motifs. **Nature**, v. 347, n. 6289, p. 203-6, 1990.

PG-156A - Interação da porfirina catiônica meso-tetrakis (4-N-metilpiridil) com vesículas de fosfolipídio nos estados gel e líquido cristalino

DE SOUSA NETO, Diógenes de¹; TABAK, Marcel¹

diogenes@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este estudo reúne os principais resultados de fluorescência estática e resolvida no tempo sobre a interação da porfirina meso-tetrakis (4-metilpiridil), na forma de base livre (TMPyP), com vesículas de fosfolipídio. Tal estudo foi também realizado através das técnicas de potencial zeta e espalhamento de luz dinâmico (DLS, do inglês “dynamic light scattering”). As vesículas de fosfolipídio foram formadas pela mistura dos fosfolipídios zwiteriônico 1,2-dipalmitoil-sn-glicero-3-fosfocolina (DPPC) e aniónico 1,2-dipalmitoil-sn-3-glicero-[fosfo-rac-(1-glicerol)] (DPPG), à diferentes razões molares. Estes sistemas foram preparados através do método de extrusão para a obtenção de vesículas grandes unilamelares (LUV, do inglês “large unilamellar vesicles”). Os estudos acima foram realizados abaixo (25 oC) e acima (50 oC) da temperatura de transição de fase gel-líquido cristalino destes fosfolipídios (~ 41 oC). As análises dos dados de fluorescência indicaram que a atração eletrostática entre os substituintes (positivamente carregados) da porfirina TMPyP e o grupo das cabeças polares (camada de Stern) das vesículas de fosfolipídio desempenha um papel fundamental na associação da porfirina. A partição da TMPyP entre o meio aquoso (tampão) e as vesículas de fosfolipídio foi evidenciada pela coexistência de um tempo de vida de fluorescência mais curto (~ 5 ns) e outro mais longo (~ 9-11 ns), respectivamente. Estudos adicionais mostram que a partição da porfirina é afetada pela concentração de sal na solução. Os resultados de supressão de fluorescência com o supressor iodeto de potássio (KI) indicaram que a TMPyP está preferencialmente localizadas na região da camada de Stern. Este resultado foi confirmado pelos estudos de potencial zeta e de DLS, os quais mostraram uma neutralização parcial das cargas negativas na superfície das vesículas devido à associação da porfirina.

Palavras-chave: Porfirina catiônica. Vesículas de fosfolipídio. Fluorescência.

Referências

- 1 SANTIAGO, P.S.; DE SOUSA NETO, D.; GANDINI, S.C.M.; TABAK, M. On the localization of water-soluble porphyrins in micellar systems evaluated by static and time-resolved frequency-domain fluorescence techniques. **Colloid Surfaces B: Biointerface**, v. 65, n.2, p.247-256, Sept. 2008. DOI:10.1016/j.colsurfb.2008.04.010.

PG-156B - Interaction of the cationic meso-tetrakis (4-N-methylpiridyl) porphyrin with gel and liquid crystalline state phospholipid vesicles

DE SOUSA NETO, Diógenes de¹; TABAK, Marcel¹

diogenes@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

This study presents the main time-resolved and steady-state fluorescence results on the interaction of the meso-tetrakis (4-methylpyridil), at the free base form (TMPyP), with phospholipid vesicles. This investigation was also carried out using zeta potential and dynamic light scattering (DLS) techniques. The phospholipid vesicles were formed by the mixture of the zwitterionic dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC) and anionic 1,2-dipalmitoyl-sn-3-glycero-[phospho-rac-(1-glycerol)] (DPPG) phospholipids, at different molar ratios.). The phospholipid vesicles were prepared through the extrusion method in order to obtain large unilamellar vesicles (LUV). The experiments were performed below (25 oC) and above (50 oC) the main gel-liquid crystalline phase transition temperature of these phospholipids (~ 41 oC). The fluorescence data analyses indicated that the electrostatic attraction between the porphyrin substituents (positively charged) and the polar head groups of the phospholipid vesicles (Stern layer) plays an important role on the porphyrin binding affinity. The porphyrin partitioning between the aqueous medium (buffer) and the phospholipid vesicles was evidenced by the coexistence of a shorter (~ 5 ns) and a longer (~ 9-11 ns) fluorescence lifetimes, respectively. Additional time-resolved experiments also showed a redistribution of the porphyrin at increasing salt concentration. The quenching studies, using potassium iodide (KI) as quencher, indicated that the TMPyP is preferentially localized at the Stern layer region. This result is in agreement with the zeta potential and DLS findings, which demonstrated a partial neutralization of the negative charges at the vesicle surface due to the porphyrin association.

Keywords: Cationic porphyrin. Phospholipid vesicles. Fluorescence spectroscopy.

References

- 1 SANTIAGO, P.S.; DE SOUSA NETO, D.; GANDINI, S.C.M.; TABAK, M. On the localization of water-soluble porphyrins in micellar systems evaluated by static and time-resolved frequency-domain fluorescence techniques. **Colloid Surfaces B: Biointerface**, v. 65, n.2, p.247-256, Sept. 2008. DOI:10.1016/j.colsurfb.2008.04.010.

PG-157A - Bases estruturais da seletividade hPPAR β -LBD:GW0742

BATISTA, F.A.H.¹; TRIVELLA, D. B. B.²; BERNARDES, Amanda¹; FIGUEIRA, A.C.M.³; OLIVEIRA, P. S. L.³; GRATIERI, J.¹; WEBB, P.⁴; POLIKARPOV, Igor¹

fernandabatista@ursa.ifsc.usp.br

² Instituto de Química - Universidade Estadual de Campinas

³ Centro Nacional de Pesquisas em Energia e Materiais - LNBio

⁴ Diabetes Center and Cancer Research Unit - The Methodist Hospital Research Institute

PPARs são fatores de transcrição envolvidos no metabolismo de ácidos graxos e glicose. Esforços têm sido feitos no sentido de desenvolver agonistas seletivos para cada isotipo de PPAR, utilizados no tratamento de doenças cardíacas e metabólicas, processos inflamatórios, desordens de pele, câncer e diabetes 1; 2; 3. Apesar disto, as bases moleculares que explicam a ligação dos agonistas seletivos não são completamente compreendidas. Analisando o complexo cristalográfico PPAR β -LBD:GW0742 e comparando nossa estrutura às estruturas dos PPARs α e γ complexados com agonistas seletivos e pan agonistas, sugerimos aminoácidos que podem estar relacionados à seletividade do ligante GW0742 pelo PPAR β . Dois destes resíduos foram mutados e os PPAR mutantes e nativos foram testados em relação à ligação e ativação pelo agonista GW0742, usando métodos experimentais e computacionais. Os resultados indicaram que substituições por grupos volumosos encontrados nos isotipos α e γ podem impedir a adequada interação entre o PPAR e o ligante, uma vez que estas substituições estão implicadas em menor ativação do receptor, reorientação do ligante no sítio de ligação e ajustes na estrutura do receptor. Além disto, notamos um posicionamento distinto dos resíduos pertencentes ao charge-clamp nos mutantes β , bem como nas estruturas nativas dos isotipos α e γ , o qual pode alterar a interação dos PPARs pelo coativadores. Tais resultados indicam algumas bases moleculares envolvidas na seletividade de compostos pelo PPAR β .

Palavras-chave: Receptor nuclear. Agonista. Seletividade.

Referências

- 1 DESVERGNE, B.; WAHLI, W. Peroxisome proliferator-activated receptors: nuclear control of metabolism. **Endocrine Reviews**, v. 20, n.5, p.649-688, 1999. DOI: 10.1210/er.20.5.649.
- 2 KERSTEN, S.; DESVERGNE, B.; WAHLI, W. Roles of PPARs in health and disease. **Nature**, v. 405, n.6785, p.421-424, May 2000.
- 3 HEIKKINEN, S.; AUWERX, J.; ARGAMANN, C.A. PPARgamma in human and mouse physiology. **Biochimica and Biophysica Acta**, v.1771, n.8, p.999-1013, 2007. DOI:10.1016/j.bbapplied.2007.03.006

PG-158A - Estudos em biologia estrutural da enzima Heme Oxigenase de *Plasmodium falciparum* - alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de fármacos antimaláricos

MALUF, Fernando Vasconcelos¹; GARCIA, Celia R. S.²; OLIVA, Glaucius¹; GUIDO, Rafael V. C.¹

fernandovmaluf@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Grupo de Cristalografia - Universidade de São Paulo

² Instituto de Biociências - Universidade de São Paulo

A malária é responsável pela morte de aproximadamente 2 milhões de indivíduos a cada ano (1), havendo perspectivas de agravamento da situação atual com o surgimento de casos de resistência aos fármacos disponíveis para o controle e tratamento. Nesse sentido, torna-se de extrema importância a seleção de novos alvos moleculares e o planejamento de agentes quimioterápicos inovadores contra a malária (2). Recentemente, demonstrou-se a existência de um gene em *Plasmodium falciparum*, o agente etiológico da forma mais severa de malária, que codifica para a enzima heme oxigenase (PfHO) (3). A presença dessa enzima no parasita sugere um mecanismo alternativo de detoxicação celular, representando um alvo molecular atrativo para o desenvolvimento de novos fármacos antimaláricos. Estudos de biologia estrutural encontram-se em andamento para elucidação da estrutura 3D da PfHO, permitindo a identificação dos elementos estruturais responsáveis pelo processo de reconhecimento molecular e seletividade. A PfHO foi obtida por expressão heteróloga e purificada por cromatografia com um rendimento de 25 mg/L de cultura. Após a triagem de condições de cristalização, a condição mais promissora foi identificada e otimizada (3.5 mg/mL de 6xHisPfHO, 12% Peg 8000, 0.2 M Acetato de Magnésio, 0.1 M Hepes pH 7.4 a 18° C), favorecendo a obtenção de cristais adequados para os experimentos de difração de raios-X. Os dados cristalográficos foram coletados nos Síncrotrons Europeu (ESRF) e Norte Americano (NSLS). Os melhores conjuntos de dados foram obtidos nas resoluções de 2.7 Å e 2.5 Å, sendo o último processado com estatísticas favoráveis (Grupo espacial (P63), para última faixa de resolução I/sigma (5.0), Rmerge (48.2%), completeza (100%), multiplicidade (5.0)). Estratégias de substituição molecular encontram-se em andamento para a determinação da estrutura 3D da PfHO. Os dados estruturais da PfHO integrados com as técnicas modernas em química medicinal permitirão a identificação e planejamento de novos candidatos a agentes antimaláricos.

Palavras-chave: Malária. Heme oxigenase. Química medicinal.

Referências

- 1 SNOW, R.W. et al. The global distribution of clinical episodes of *Plasmodium falciparum* malaria. **Nature**, v.434, p 214-217, 2005. DOI:10.1038/nature03342.
- 2 GUIDO, R. V. C.; OLIVA, G. Structure-based drug discovery for tropical diseases. **Current Topics in Medicinal Chemistry**, v.9, n.9, p.824-843, 2009.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 SARTORELLO, R. et al. In vivo uptake of a heme-analogue Zn-Protoporphyrin IX by the human malaria parasite *P. falciparum*. **Cell Biology International**, v. 34, n.8, p.859-865, 2010.

PG-159A - Estudos bioquímicos e biofísicos da celulase Celobiohidrolase I de *Trichoderma harzianum* it 3844

COLUSSI, Francieli¹; POLIKARPOV, Igor¹

francolussi@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Os fungos filamentosos produzem enzimas capazes de degradar a celulose eficientemente. O gênero *Trichoderma* é o maior produtor de celulases e o mais estudado. O complexo celulolítico inclui endoglucanases, celobiohidrolases e β-glicosidases. A celobiohidrolase (CBHI) hidrolisa a cadeia de celulose na extremidade redutora liberando celobiose, permitindo β-glicosidases de hidrolisar celobiose em unidades de glicose (1). CBHI de *Trichoderma harzianum*, em particular, aparece como sendo o mais importante componente de enzimas para a indústria de conversão de celulose. A CBH I é a proteína predominante secretada quando o fungo é submetido a condições de indução, geralmente sendo até 60% do total das proteínas secretadas (2). Estudos cinéticos usando diferentes substratos polissacarídicos demonstraram a eficiência desta enzima que conseguiu liberar uma quantidade de açúcar maior que a mesma enzima de outros organismos. Para os estudos biofísicos, medidas de dicroismo circular foram realizadas e revelou que a quantidade de α-hélices e folhas-β é de 28% e 38%, respectivamente. Estes resultados estão em concordância com os dados observados para o modelo de homologia de ThCBHI, que foi prevista a partir de sua estrutura primária pela I-Tasser , também foram realizadas medidas para observação da estabilidade da enzima com variação de pH e temperatura por SAXS e Thermofluor, e estas mostram uma boa estabilidade desta enzima em altas temperaturas, mostrando ser um enzima interessante em processos biotecnológicos.

Palavras-chave: *Trichoderma harzianum*. Celobiohidrolase I. Hidrólise enzimática.

Referências

- 1 KLEYWEGT, G. J.; ZOU, J. Y.; DIVNE, C.; DAVIES, G. J.; SINNING, I.; STAHLBERG, J.; REINIKAINEN, T.; SRISODSUK, M.; TEERI, T. T.; JONES T. A. The crystal structure of the catalytic core domain of endoglucanase I from *Trichoderma reesei* at 3.6 angstrom resolution, and a comparison with related enzymes. **Journal of Molecular Biology**, v. 272, n.3, p. 383-397, 1997.
- 2 NUMMI, M.; NIKUPAAVOLA, M. L.; LAPPALAINEN, A.; ENARI, T. M.; RAUNIO V. Cellobiohydrolase from *Trichoderma reesei*. **Biochemical Journal**, v. 215, n.3. p. 677–683, 1983.

PG-160A - Planejamento de inibidores da enzima cruzaína candidatos a fármacos para o tratamento da doença de Chagas

PAULI, Ivani¹; ANDRICOPULO, Adriano D.²

ivanipauli@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A doença de Chagas é uma tripanossomíase que afeta milhões de pessoas no mundo, principalmente na América Latina, sendo considerada uma das doenças tropicais negligenciadas (DTNs) de mais alta prioridade nos programas de pesquisa e desenvolvimento (Lead Discovery for Drugs for Infectious Tropical Diseases) da Organização Mundial de Saúde (WHO, World Health Organization). Os medicamentos disponíveis no mercado para o combate da doença são extremamente limitados e apresentam sérios problemas, como baixa eficácia e elevada toxicidade (1). Neste contexto, o desenvolvimento de novos fármacos é de extrema importância. A identificação de alvos moleculares do parasita causador da doença, *Trypanosoma cruzi*, proporciona oportunidades atrativas em química medicinal para o planejamento de candidatos a novos fármacos. Nesse projeto de doutorado foi selecionada a enzima cruzaína (EC 3.4.22.51), a principal cisteíno protease de *T. cruzi*, como alvo molecular validado para a doença de Chagas. Os objetivos fundamentais do projeto são a identificação e planejamento de inibidores da enzima cruzaína de *T. cruzi*, como candidatos para o desenvolvimento de fármacos contra a doença de Chagas. A estratégia do projeto envolve o uso de estratégias de planejamento baseado na estrutura do receptor (SBDD, Structure-Based Drug Design) e de planejamento baseado na estrutura do ligante (LBDD, Ligand-Based Drug Design), através da integração de métodos experimentais e computacionais avançados. O projeto será desenvolvido nos Laboratório de Química Medicinal e Computacional do Instituto de Física de São Carlos. Os nossos laboratórios possuem completa infraestrutura para a realização de todas as etapas experimentais e computacionais propostas neste projeto de doutorado.

Palavras-chave: *Trypanosoma cruzi*. Cruzaina. Desenho racional de fármacos.

Referências

1 LE LOUP, G.; PIALOUX, G.; LESCURE F.X. Update in treatment of Chagas disease. **Current Opinion in Infectious Diseases**, v. 1, n.1, p.1, 2011.

PG-161A - Estudos estruturais dos receptores nucleares PPAR α e PPAR γ

SANTOS, Jademilson Celestino dos¹; BERNARDES, Amanda¹; PUHL, Ana Cristina¹; POLIKARPOV, Igor¹

jademilsonsantos@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O Receptor ativado pela proliferação de Peroxisomos(PPAR) são membros da superfamília dos receptores nucleares e funcionam como fatores de transcrição ativados por ligantes, nos quais podemos destacar os ácidos graxos e seus metabólitos. Estes receptores formam heterodímeros com outros receptores nucleares, sendo o mais conhecido o receptor X retinóide (RXR) (1). Existem três isótipos identificados de PPARs, são eles: PPAR α , PPAR β/δ e PPAR γ (2). Os PPARs têm demonstrado um papel importante na regulação da glicose, lipídios e metabolismo do colesterol. Além disso, eles funcionam como alvos para desenvolvimento de farmacos utilizados no tratamento de diabetes do tipo 2 e dislipidemia (3). Em nossos estudos estruturais, ambas as proteínas PPAR α e PPAR γ foram expressas em Escherichia coli BL21 (DE3) e purificadas por cromatografia de afinidade seguida de uma gel filtração, todas estas etapas da expressão e purificação foram acompanhadas utilizando SDS-PAGE. Estas proteínas possuem uma cauda de histidina que foi clivada com a proteína trombina. Após a clivagem, as proteínas foram concentradas para 10 mg/mL. O passo seguinte foi a realização dos ensaios de cristalização por difusão de vapor através do método hanging drop a 293K. Após três dias, observou-se em diversas condições o crescimento de cristais. Estes cristais foram então coletados pelo método de oscilação em um detector imagem de placas MAR345 no Laboratorio Nacional de Luz Sincrotron (LNLS), na linha de luz cristalografia de proteína (MX2). Os dados foram processados com o programa IMOSFLM e escalonado no SCALA. As estruturas foram resolvidas por substituição molecular usando o programa PHASER. No presente momento o refinamento das estruturas estão sendo realizados através do programa REFMAC. Todos os programas utilizados no processamento de dados estão presentes no pacote CCP4 (4).

Palavras-chave: Receptores nucleares. PPARs. Cristalografia de proteínas.

Referências

- 1 MANGELSDORF, D. J; EVANS, R. M. The RXR heterodimers and orphan receptors. **Cell**, v. 83, n.6, p. 841-850, Dec.1995.
- 2 BRAISSANT, O.; FOUFELLE, F.; SCOTTO, C.; DAUCA, M.; WAHLI, W. Differential expression of peroxisome proliferator-activated receptors (PPARs): tissue distribution of PPAR-alpha, -beta, and -gamma in the adult rat. **Endocrinology**, v. 137, n.1, p. 354-366, Jan.1996.
- 3 KERSTEN, S.; DESVERGNE, B.; WAHLI, W. Roles of PPARs in health and disease. **Nature**, v. 405, p. 421-424, 2000.
- 4 COLLABORATIVE COMPUTATIONAL PROJECT, NUMBER 4. The CCP4 suite: programs



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

for protein crystallography. **Acta Crystallographica. Section D, Biological Crystallography**, v. 50, n.5,p.760-763, Sept.1994.

PG-162A - Caracterização molecular e estrutural da selenoproteínas de *Trypanosoma brucei*

EVANGELISTA, J. P.¹; THIEMANN, O. H.¹

jaque@if.sc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Carlos

O Selênio é um micro nutriente essencial para várias formas de vida. A maior e mais fascinante forma de incorporação do selênio em proteínas é através do aminoácido selenocisteína (Sec, U), presente no sítio ativo dessas proteínas, sendo co-translacionalmente incorporado dentro do peptídeo nascente, numa posição específica de parada (stop-codon, UGA) (1, 2). As selenoproteínas, proteínas que possuem este aminoácido, estão envolvidas em diversos processos metabólicos e tem características únicas, possivelmente melhores em relação às cisteínas (1). Para entender as funções das selenoproteínas de Kinetoplastidae, nós iniciamos estudos com as proteínas SelK, SelT, e SelTryp de *Trypanosoma brucei*. Os genes selk, selt e seltryp foram sintetizados pela empresa GenScript e foram克隆ados no vetor pUC57. Nós subclonamos nos vetores pET 28 and pET 29 com as enzimas de restrição apropriadas para posteriormente ligação e transformação em células de *Escherichia coli* e assim, a expressão das proteínas SelK, SelT, e SelTryp. Para as proteínas SelK e SelTryp o protocolo de expressão necessita ser melhorado já que apresentou um rendimento baixo. Já a proteína SelT é expressa em *E. coli* na fração solúvel e sua purificação consiste em duas resinas: afinidade por níquel e exclusão molecular Superdex 200. Ensaios de cristalização foram realizados no robo Honeybee (Genomic Solutions) com conjuntos comerciais de soluções para cristalização e em algumas condições foram obtidos cristais que necessitam ser testados e melhorados. Um vez expressas e purificadas, estudos de caracterização molecular destas três proteínas SelK, SelT, e SelTryp serão realizados para determinar suas funções.

Palavras-chave: Kinetoplastidae. Selenocisteína. Selenoproteínas.

Referências

- 1 SHCHEDRINA, V. A. et al. Structure–function relations, physiological roles, and evolution of mammalian ER-resident selenoproteins. **Antioxidants & Redox Signaling**, Nebraska, v.12, n.7, p.839-849, 2010.
- 2 LOBANOV, A.V. et al. Eukaryotic selenoproteins and selenoproteomes. **Biochimica et Biophysica Acta**, USA, v. 1790, n. 11, p. 1424-1428, 2009.

PG-163A - Estrutura cristalográfica da subunidade d da hemoglobina gigante de *Glossoscolex paulistus*

BACHEGA, José Fernando Ruggiero¹; GARRATT, Richard Charles¹

ferbachega@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Glossoscolex paulistus é uma anelídeo comumente encontrado na região sudeste do Brasil, próximo a cidade de Piracicaba, no interior do estado de São Paulo. Sua hemoglobina (HbGp) é um complexo extracelular e apresenta vários efeitos de alosterismo e cooperatividade. HbGp é composta por 4 tipos de cadeias globina, a, b, c e d, e por 3 tipos de cadeia linkers, denominadas L1, L2 e L3. No complexo, uma associação de 12 cadeias globina (abcd)₃ somados a um hétero trímero de linkers, formam uma estrutura denominada protômero, ou estrutura cogumelo (1). O protômero é então repedido 12 vezes, formando a unidade carregadora de oxigenio (hemoglobina) denominada eritrocruorina (2). Esta é composta e por um total de 180 cadeias polipeptídicas, somando 3.6 MDa de massa molecular. Recentemente, foi reportado por nós, a estrutura cristalográfica preliminar da partícula inteira da HbGp sendo esta a segunda estrutura cristalográfica de uma eritrocruorina tipo 1, reportada na literatura (3). No presente trabalho, a subunidade d foi então isolada a partir do complexo inteiro, cristalizada e sua estrutura cristalográfica resolvida por difração de raios X. Os cristais foram obtidos na codição 0.1 M Hepes/HCl pH 7.5 e 1.4 M critrato de sódio, e são pertencentes ao grupo espacial I222 (a=52.80, b= 63.63 e c=81.77). Os dados foram processados a uma resolução 2.25 Å, e o problema das fases foi resolvido pelo método de substituição molecular (utilizando-se a cadeia d da estrutura de Lumbricos terrestris – 2GTL). Uma única cadeia globina compreende a unidade assimétrica, porem com as operações de simetrias associadas ao grupo especial, um dímero e um tetrâmero são gerados e preditos como sendo estáveis em solução. Pela primeira vez, foi possível comparar os contatos de uma subunidade globina isolada com o arranjo de globinas presentes na partícula inteira da HbGp.

Palavras-chave: Hemoglobina. Estrutura tridimensional. *Glossoscolex paulistus*.

Referências

- 1 CARVALHO, F. A. O.; SANTIAGO, P. S.; BORGES, J. C.; TABAK, M. On the molecular mass of the extracellular hemoglobin of *Glossoscolex paulistus*: analytical ultracentrifugation reexamination. **Analytical Biochemistry**, v. 385, n. 2, p. 257-263, 2008.
- 2 ROYER, W. E.; STRAND, K.; VAN HEEL, M.; HENDRICKSON, W. A. Structural hierarchy in erythrocruorin, the giant respiratory assemblage of annelids. **Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America**, v. 97, n. 13, p. 7107-7111, 2000.
- 3 BACHEGA, J. F. R.; BLEICHER, L.; HORJALES, E. R.; SANTIAGO, P. S.; GARRATT, R. C.; TABAK, M. Crystallization and preliminary structural analysis of the giant haemoglobin from *Glossoscolex paulistus* at 3.2 angstrom. **Journal of Synchrotron Radiation**, v. 18, p. 24-28, 2011.

PG-164A - Interações com lipídeos não específicos induzem a formação de estruturas ricas em folhas-β em SEPT2, que podem estar relacionadas a amilóides

DAMALIO, Julio Cesar Pissuti¹; NOBRE, Thatyane Morimoto¹; GARRATT, Richard Charles¹; OLIVEIRA JUNIOR, Osvaldo Novais de¹; ARAUJO, Ana Paula Ulian de¹
juliodamalio@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Septinas fazem parte de um grupo de proteínas ligantes de GTP e formação de filamentos, que estão envolvidas em vários processos celulares. As septinas podem ser divididas em três domínios: um N-terminal de sequência variável, contendo uma região polibásica responsável pela ligação a lipídeos, um domínio GTPase, e uma região C-terminal. A função de Septin 2 (SEPT2) permanece incerta, entretanto SEPT2, SEPT1 and SEPT4 foram encontradas acumuladas em depósitos conhecidos como emaranhados de neurofibrilas, na doença de Alzheimer. Nesse estudo, a SEPT2 humana, e seu domínio GTPase (SEPT2G) foram expressas em *E. coli* e purificadas por cromatografia de afinidade e de exclusão molecular. Ambas as proteínas formam homodímeros *in vitro*, sugerindo que o domínio GTPase é suficiente para promover a oligomerização. A desnaturação térmica revelou o aumento de estrutura secundária em folhas-β e a formação de agregados em temperatura fisiológica, agregados esses com habilidade de se ligarem a uma sonda específica para fibras amilóides, a Tioflavina-T, sugerindo que SEPT2 e SEPT2-G formem fibras amilóides. Interessantemente, os experimentos de interação com fosfolipídeos mostraram que SEPT2 possui uma interação mais forte com fosfatidil-inositol-4,5-bifosfato (PtdIns(4,5)P2), quando comparado ao dipalmitoilfosfato (DPPC). Resultados a partir de medidas de PM-IRRAS indicaram que a estrutura secundária de SEPT2 é preservada na interação com PtdIns(4,5)P2, e não no caso de DPPC. Esses resultados nos permitem presumir que SEPT2 pode se organizar em filamentos amilóides, e que esse processo pode ser devido a interação com lipídeos inespecíficos. Compreender a habilidade de SEPT2 de se ligar ao PtdIns(4,5)P2 nas membranas, como mostrado aqui, pode abrir novos caminhos para explorarmos as causas de doenças neurodegenerativas em níveis moleculares.

Palavras-chave: Homofilamentos. Amilóides. Septina.

Referências

- 1 HALL, Peter A.; RUSSELL, S. E. H.; PRINGLE, John R. **The septins**. Chichester: John Wiley & Sons, 2009. 380p.

PG-165A - Planejamento racional de novos inibidores das enzimas Aldolase e Fosfofrutoquinase de *Trypanosoma brucei*

FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹; THIEMANN, Otávio Henrique¹

leonardo@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

As doenças tropicais, que atingem as populações mais carentes de todo o mundo, representam em termos socioeconômicos uma grande preocupação global. As tripanossomíases estão entre as doenças parasitárias mais importantes, e dentre estas, destaca-se a tripanossomíase africana ou doença do sono, uma doença fatal causada pelo parasita unicelular *Trypanosoma brucei*. Dentre os potenciais alvos metabólicos considerados para o desenvolvimento de novos fármacos para a tripanossomíase, a glicólise surge como uma via promissora em função de seu papel vital no processo gerador de ATP da forma sanguínea do parasita (1). Este trabalho visa identificar novos inibidores de duas enzimas da via glicolítica do parasita: aldolase (EC 4.1.2.13) e fosfofrutoquinase (EC 2.7.1.11). Inibidores destas enzimas são candidatos a novos agentes tripanocidas com alto potencial de desenvolvimento clínico, considerando-se que os respectivos alvos macromoleculares são validados para o planejamento de novos fármacos. A estratégia utilizada envolve o uso de técnicas de planejamento baseadas na estrutura do receptor (SBDD, do inglês Structure-Based Drug Design) em conjunto com metodologias baseadas na estrutura do ligante (LBDD, do inglês Ligand-Based Drug Design) para a identificação de inibidores seletivos das enzimas-alvo, através da integração de métodos computacionais e experimentais. Dentre estas metodologias, foram desenvolvidos protocolos de expressão e purificação para as enzimas alvo, padronização de ensaios cinéticos in vitro, experimentos in silico, tais como o ensaio virtual (VS, do inglês Virtual Screening) e o desenvolvimento de relações quantitativas entre estrutura e atividade (QSAR, do inglês Quantitative-Structure Activity Relationships).

Palavras-chave: Aldolase. Fosfofrutoquinase. Tripanossomíase.

Referências

- 1 OPPERDOES, F. R.; MICHELS, P. A. M. Enzymes of carbohydrate metabolism as potential drug targets. **International Journal for Parasitology**, v. 31, n. 5, p. 482-490, 2001.

PG-166A - Estudos biofísicos da selenofosfato sintetase (SPS2) de *Trypanossoma brucei* and *Leishmania major*

FAIM, L. M.¹; SILVA, I. R¹; DIAS M. V. B²; BLUNDELL, T²; BORGES, J.C.³; THIEMANN, O. H.¹

livia_faim@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Department of Biochemistry - University of Cambridge

³ Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

Selenocisteína (Sec) é um aminoácido conhecido como não usual e esta presente em algumas proteínas humanas, de bactéria e parasitas (selenoproteínas). Sec é co-traducionalmente incorporada em selenoproteínas através do códon UGA. Esta incorporação é dependente de um doador de selenio biológico, monoselenofosfato (MSP) (1). A enzima selenofosfato sintetase (SPS2) exerce um papel crucial neste processo, pois é responsável por catalisar a formação de MSP a partir de ATP e seleneto. Estudos recentes (4, 5) identificaram a presença da via de biossíntese de Sec em Kinetoplastida e a caracterização molecular da SPS2 de *Trypanosoma brucei* e *Leishmania major* tem sido estabelecida. Subsequentemente, experimentos de RNA de interferência da SPS2 de *T. brucei* demonstraram que esta enzima é essencial para a sobrevivência do parasito e consequentemente um possível alvo para o desenho de fármacos. Entretanto, nenhuma caracterização estrutural desta enzima em ambos organismos tem sido reportada. Estudos estruturais e biofísicos destas proteínas podem fornecer um entendimento amplo do mecanismo de catálise e contribuir para o desenvolvimento de novos fármacos contra estes parasitos. Usando uma combinação de técnicas biofísicas que incluem espalhamento dinâmico de luz, ultracentrifugação analítica e SAXS, nos temos determinado o estado oligomérico como dímerico para SPS2 de ambos organismos. Além disso, modelos estruturais por homologia foram construídos e mostraram acordo com os resultados de SAXS. Para elucidar os detalhes estruturais destas enzimas, nos estamos trabalhando para obter estruturas cristalográficas na forma nativa e em complexo com substratos e análogos. Ensaios de cristalização foram realizados e cristais foram obtidos e otimizados para a SPS2 de *T. brucei*. Os melhores cristais para SPS2 nativa cresceram a 18°C na condição contendo 0,1M Tri – citrato de sódio (pH 5,6), 17% Peg 3350, usando método microbatch em óleo de parafina. Cristais do complexo SPS2:MgCl₂: AMP-PCP foram obtidos em 0,02M Tri-citrato de sódio, 12% Peg 6000 pelo método de difusão de vapor, gota pendurada. Ambos cristais difrataram a resolução limite de 3 Å no feixe de linha I02, Diamond. Análise do padrão de difração apontou os cristais como altamente anisotrópicos e o L – test revelou um |L|=0,4, próximo à um cristal de twin perfeito. No momento, nos estamos trabalhando em novas construções, focando na remoção do N – terminal flexível com intuito de obter cristais adequados para determinação da estrutura.

Palavras-chave: Monoselenofosfato. Selenofosfato sintetase. Selenocisteína.

Referências

- 1 STADTMAN, T. C. Selenocysteine. **Annual Review of Biochemistry**, v. 65, p. 83–100, 1996.
- 2 FORCHHAMMER, K.; BÖCK, A. Selenocysteine synthase from Escherichia coli. analysis of the reaction sequence. **Journal of Biological Chemistry**, v. 266, p. 6324–6328, 1991.
- 3 EHRENREICH, A.; FORCHHAMMER, K.; TORMAY, P.; VEPREK, B.; BÖCK, A. Selenoprotein synthesis in E. coli. Purification and characterisation of the enzyme catalysing selenium activation. **European Journal of Biochemistry**, v. 206, p. 767–773, 1992.
- 4 CASSAGO, A.; RODRIGUES, E.M.; PRIETO, E.L. Identification of Leishmania selenoproteins and SECIS element. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 149, p. 128–34, 2006.
- 5 LOBANOV, A. V.; GROMER, S.; SALINAS, G.; GLADYSHEV, V. N. Selenium metabolism in Trypanosoma: characterization of selenoproteomes and identification of a kinetoplastida-specific selenoprotein. **Nucleic Acids Research**, v. 34, p. 4012–24, 2006.
- 6 COSTA, F.C.; OLIVA, M.A.V.; DE JESUS, T.C.L.; SCHENKMAN, S.; THIEMANN, O.H. Oxidative stress protection of Trypanosomes requires selenophosphate synthase. **Molecular and Biochemical Parasitology**, 2011. In press.

PG-166B - Biophysical Studies of selenophosphate synthetase (SPS2) from *Trypanosoma brucei* and *Leishmania major*

FAIM, L. M¹; SILVA, I. R¹; DIAS M. V. B²; BLUNDELL, T²; BORGES, J.C.³; THIEMANN, O. H.¹

livia_faim@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Department of Biochemistry - University of Cambridge

³ Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

Selenocysteine (Sec) is an unusual amino acid known to be present in some human, bacterial and parasite proteins. Sec is co-translationally incorporated into selenoproteins through a UGA codon. This incorporation is dependent on a biological selenium donor, monoselenophosphate (MSP) (1). The enzyme selenophosphate synthetase (SPS2) is a key player in this process, as it is responsible for catalyzing the formation of MSP from ATP and selenide. Recent studies (4, 5) identified the presence of the Sec biosynthesis pathway in kinetoplastid parasites and molecular characterization of the SPS2 from *Trypanosoma brucei* and *Leishmania major* has been established. Subsequently, RNA interference experiments of the *T. brucei* SPS2 demonstrated that this enzyme is essential for the parasite survival and consequently a possible target for drug design. However, no structural characterization of this enzyme in both organisms has been reported. Biophysical and structural studies of these enzymes might provide a thorough understanding of the mechanism of catalysis and contribute to the development of new drugs against these parasites. Using a combination of biophysical techniques that include dynamic light scattering, analytical ultracentrifugation, and SAXS, we have determined the oligomeric state of these proteins as a dimer in both organisms. In addition, structural models were built by homology and showed to be in agreement with SAXS results. In order to elucidate the structural details of these enzymes, we are working to obtain crystallographic structures in the native form and in complex with substrates and analogues. Crystallization trials were performed and crystals were obtained and improved for *T. brucei* SPS2. The best crystals for apo SPS2 were grown at 18 °C under conditions containing 0.1M Tri – sodium citrate (pH 5.6), 17% Peg 3350, using microbatch method on parafine oil. SPS2:MgCl₂: AMP-PCP crystals were obtained in 0.02M Tri-sodium citrate, 12% Peg 6000 by hanging – drop, vapor diffusion method. Both crystals diffracted at a limit resolution of 3 Å on beamline I02 of the Diamond Light Source. Diffraction pattern analysis pointed the crystals as highly anisotropic and the L-test revealed a mean |L|=0.4, close to a perfect twin crystal. At the moment we are working on new constructs, focusing on the removal of the flexible N-terminal in order to improve the quality of the diffraction data and enable structure solving.

Keywords: Monoselenophosphate. Selenophosphate synthetase. Selenocysteine.

Referências

1 STADTMAN, T. C. Selenocysteine. **Annual Review of Biochemistry**, v. 65, p. 83–100, 1996.

2 FORCHHAMMER, K.; BÖCK, A. Selenocysteine synthase from *Escherichia coli*: analysis of the reaction sequence. **Journal of Biological Chemistry**, v. 266, p. 6324–6328, 1991.

3 EHRENREICH, A.; FORCHHAMMER, K.; TORMAY, P.; VEPREK, B.; BOCK, A. Selenoprotein synthesis in *E. coli*: purification and characterisation of the enzyme catalysing selenium activation. **European Journal of Biochemistry**, v. 206, p. 767–773, 1992.

4 CASSAGO, A.; RODRIGUES, E.M.; PRIETO, E.L. Identification of *Leishmania* selenoproteins and SECIS element. **Molecular and Biochemical Parasitology**, v. 149, p. 128–34, 2006.

5 LOBANOV, A.V; GROMER, S.; SALINAS, G.; GLADYSHEV, V.N. Selenium metabolism in Trypanosoma: characterization of selenoproteomes and identification of a kinetoplastida-specific selenoprotein. **Nucleic Acids Research**, v. 34, p. 4012–24, 2006.

6 COSTA, F.C.; OLIVA, M.A.V.; DE JESUS, T.C.L.; SCHENKMAN, S.; THIEMANN, O.H. Oxidative stress protection of Trypanosomes requires selenophosphate synthase. **Molecular and Biochemical Parasitology**, 2011. In press.

PG-167A - Identificação de elementos estruturais no tRNAs e determinantes da ligação com proteínas

MANZINE, Livia Regina¹; SERRÃO, Vitor Hugo Balasco¹; SOUZA, Marcos Michel¹; THIEMANN, Otavio Henrique¹

livia@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Em *Escherichia coli* a formação e incorporação do aminoácido selenocisteína deve-se a uma complexa via de biosíntese cujas principais proteínas envolvidas são: Selenocisteína Sintase (SELA), Fator de Elongação de Selenocisteína, Selenofosfato Sintetase, Seril-tRNAs e Sintetase, além do tRNA próprio denominado tRNA de Inserção de Selenocisteína (SELC) (1) e de uma sequência específica que promove uma alça no RNA mensageiro, denominada Sequência de Inserção Selenocisteína (2-3). O objetivo do trabalho baseou-se na realização de estudos bioquímicos da proteína SELA com seu ligante específico (SELC) para determinação de parâmetros cinéticos e estequiométricos. O gene codificante para a proteína SELA foi subclonado e posteriormente realizou-se a expressão em linhagem bacteriana (WL81460) deficiente no gene selC, consequentemente não havendo produção do ligante específico. Posteriormente, estudos de estabilidade térmica por dicroísmo circular foram realizados com essa proteína apo para caracterização de sua estabilidade frente à variação de temperatura. Ensaios de anisotropia de fluorescência buscaram determinar a constante de oligomerização da proteína SELA, a qual se apresenta como um decâmero, bem como estimar a afinidade de ligação de SELA pelo ligante SELC. Esse mesmo ensaio foi realizado com outros tRNAs mutantes do ligante SELC com o objetivo de realizar um mapeamento prévio das regiões de SELC que poderiam ser relevantes para a formação do complexo SELA-SELC. A mesma técnica foi empregada para determinação da estequiometria de ligação do complexo SELA-SELC e os resultados obtidos mostram-se bastante interessantes, pois divergem dos dados encontrados na literatura que sugerem uma estequiometria de 1 molécula de SELA para 5 moléculas de SELC.

Palavras-chave: Selenocisteína. Selenocisteína sintase. Anisotropia de fluorescência.

Referências

- 1 LEINFELDER, W.; FORCHHAMMER, K.; ZINONI, F.; SAWERS, G.; MANDRAND-BERTHELOT, M. A.; BÖCK, A. *Escherichia coli* genes whose products are involved in selenium metabolism. **Journal of Bacteriology**, v. 170, n. 2, p. 540-546, 1988.
- 2 LOW, S. C.; BERRY, M. J. Knowing when not to stop: selenocysteine incorporation in eukaryotes. **Trends Biochemical Science**, v. 21, n. 6, p. 203-208, 1996.
- 3 HATFIELD, D. L.; GLADYSHEV, V. N. How selenium has altered our understanding of the genetic code. **Molecular and Cell Biology**, v. 22, n. 11, p. 3565-3576, 2002.

PG-168A - Efeitos da terapia fotodinâmica em células sadias e células neoplásicos após múltiplas aplicações

SABINO, Luis Gustavo¹; KURACHI, Cristina¹

lgsabino@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A terapia fotodinâmica (TFD) é uma modalidade terapêutica empregada no tratamento de lesões neoplásicas e inclusive alguns tipos de câncer. A ação fotodinâmica se baseia na aplicação de um agente fotossensibilizador (FS), que se acumula seletivamente nas células cancerosas, e quando iluminado por uma fonte de luz de comprimento de onda específico, desencadeia uma reação foto-química que produz uma série de espécies reativas de oxigênio (ERO) (1). Dentre as ERO o oxigênio singuleto é o principal responsável pela morte celular e a destruição tecidual. Muitos estudos clínicos têm sido realizados desde a década de 80, vários casos de câncer de esôfago têm sido tratados com a TFD, os resultados têm mostrado que a técnica é capaz de eliminar lesões neoplásicas, preferencialmente em suas fases iniciais. Os FS's usados em estudos de TFD absorvem luz vermelha (630 nm), pois tem favorável relação (penetração no tecido) / (absorção pelo FS). Mesmo assim, a necrose causada pela ação fotodinâmica se limita a alguns milímetros de profundidade, em alguns casos o dano causado pela TFD no tumor não promove a resposta desejável, sendo necessária a aplicação subsequente da TFD, procedimento ainda pouco estudado. Em estudos clínicos, caso a TFD não cause a destruição tumoral, técnicas convencionais são utilizadas para evitar a recidiva tumoral. Além disso, observa-se na clínica que a resposta do tumor recidivo às aplicações subsequentes da TFD, é gradualmente diminuída, sugerindo que há um aumento na resistência tumoral à TFD (2, 3). No trabalho proposto, investigamos a resposta de células de hepatocarcinoma "in vitro" à TFD em múltiplas sessões; culturas de fibroblastos humanos serão submetidas à TFD, como grupo controle. Simulações e modelagem matemática foram realizadas para interpretar e avaliar o potencial da TFD em casos onde várias sessões seriam necessárias para erradicar as células neoplásicas. Resultados preliminares mostraram que a variação da resistência celular à TFD "in vitro" pode ser resultado da seleção de células mais resistentes durante a ação fotodinâmica (4).

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Células tumorais. Seleção celular.

Referências

- 1 DOUGHERTY, Thomas J. Photodynamic therapy. **Journal of the National Cancer Institute**, v. 90, n.12, p.889-905, 1998.
- 2 MAIER, Alfred. Palliation of advanced esophageal carcinoma by photodynamic therapy and irradiation. **Annals of Thoracic Surgery**, v. 69, n. 4, p. 1006-1009, 2000.
- 3 CORTI, Luigi. Outcome of patients receiving photodynamic therapy for early esophageal cancer. **International Journal of Radiation Oncology Biology Physics**, v. 47, n. 2, p. 419-424, 2000.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

- 4 SABINO, Luis Gustavo. Experimental evidence and model explanation for cell population characteristics modification when applying sequential photodynamic therapy. **Laser Physics Letters**, v. 8, n. 3, p.239-246, 2011.

PG-169A - Recuperação de atividade enzimática por reconstrução de porção aminoterminal

LIBERATO, Marcelo Vizoná¹; POLIKARPOV, Igor¹

mvliberato@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Com o crescente interesse da utilização da biomassa vegetal como fonte de energia, as enzimas xilanolíticas, que já eram amplamente usadas em vários processos industriais como branqueamento de polpas Kraft e alimentação animal, vêm sendo também objeto de estudo para a degradação de resíduos hemicelulósicos. O xilano é o principal polissacarídeo constituinte do complexo hemicelulósico das plantas e consiste de uma cadeia principal formada por resíduos de xilose unidos por ligações β -1,4-glicosídicas. A endo β -1,4 xilanase (EC 3.2.1.8) forma o principal grupo de enzimas envolvidas na degradação do xilano, liberando xilo-oligossacarídeos maiores que são posteriormente hidrolisados por exo-xilanases (1). Como a grande maioria dos processos industriais envolvem múltiplos passos que abrangem altas temperaturas e variadas condições de pH, resolvemos focar o nosso estudo nas xilanases termoestáveis da família 11, que são enzimas mais específicas atuando exclusivamente na hidrólise de substratos contendo resíduos de D-xilose (2). Em trabalho anterior, o gene da xilanase do organismo *Caldicellulosiruptor sp. Rt69B.1* foi sintetizado tendo seus limites determinados de acordo com a predição do programa BLAST e indicação da própria sequencia nucleotídica depositada no Genbank. Porém a enzima expressa apresentou atividade cerca de 1000 vezes menor que o esperado. No presente trabalho foi feita a reconstrução da porção aminoterminal da xilanase baseando-se no alinhamento com outras xilanases da família 11 e na predição de sítio de clivagem de peptídeo sinal. A complementação da porção aminoterminal foi feita por meio de amplificação por PCR. Em seguida a enzima foi expressa, purificada e cristalizada para determinação estrutural. Por fim, testes enzimáticos comprovaram o sucesso da reconstrução onde a enzima apresentou atividade esperada.

Palavras-chave: Xilanase. Reconstrução. Aminoterminal.

Referências

- 1 KULKARNI, N.; SHENDYE, A.; RAO, M. Molecular and biotechnological aspects of xylanases. **FEMS Microbiology Reviews**, v. 23, n. 4, p. 411-456, 1999.
- 2 JEFFRIES, T. W. Biochemistry and genetics of microbial xylanases. **Current Opinion in Biotechnology**, v. 7, n. 3, p. 337-342, 1996.

PG-170A - Expressão purificação e caracterização da proteína U5-15K de *Trypanosoma brucei*

SOUZA, M. M.¹; LIMA, A. L.¹; MARTIL, D. E.¹; SILVA, M. T. A.¹; THIEMANN, O. H.¹
marcosmichel@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física - Universidade de São Paulo

As doenças negligenciadas assolam a vida de bilhões de pessoas por ano e ameaçam outras milhões. As tripanosomíases são causadas por protozoários parasitas da família Trypanosomatidae. Várias evidências sugerem importantes diferenças entre a maquinaria de tradução e processamento de mRNA (trans-splicing) em Tripanosomatídeos quando comparados com eucarióticos superiores. Neste contexto, alguns fatores importantes para o funcionamento da célula eucarióticas são os pequenos complexos constituídos de proteínas e RNA, chamados de ribonucleoproteínas (U snRNPs). Esta partículas possuem papel essencial no processamento de RNA mensageiros e durante a reação de splicing apresenta um core comum composto por proteínas (proteínas Sm) and RNAs estruturais (U snRNAs) e um conjunto de proteínas específicas de cada complexo. Foi demonstrado que U5-15K e 45-102K são altamente conservadas entre o Tripanosomatídeos e os domínios Dim1 and Prp1 foram identificados, respectivamente. A U5-15K, essencial para a viabilidade celular, é altamente conservada de kinetoplastidas ao ser humano e está envolvida tanto no cis quanto no trans-splicing. O objetivo desde trabalho é fazer um estudo estrutural e bioquímico da proteína U5-15k de *Trypanossoma brucei*. Nesse trabalho se fez uma otimização da expressão e purificação dessa proteína bem como a caracterização do processo de autoclivagem e os inibidores dela, também foi feita uma análise preliminar da sua estrutura através espalhamento de raios X a baixos ângulos.

Palavras-chave: Trans-splicing. U5-15K. *Trypanosoma brucei*.

Referências

- 1 SILVA, M. T. A. **Identificação e caracterização funcional de proteínas específicas do complexo U5 snRNP em Tripanosomatídeos.** 2009. 119 p. Tese (Doutorado em Biotecnologia) - Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, Araraquara, 2009.

PG-171A - Caracterização molecular da proteína poly(A)-binding protein de *Trypanosoma brucei*

OLIVA, Maria Amélia¹; THIEMANN, Otavio H.¹

maoliva@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Trypanossomíases são as maiores causadoras de morte em regiões tropicais do mundo com o agravante da falta de tratamentos efetivos. Várias vias metabólicas e bioquímicas essenciais são encontradas nesses parasitas tornando-os particularmente atrativos para investigações moleculares. Esses eucariotos, em particular o *Tripanossoma brucei*, não possuem mecanismos de controle no nível transcracional, assim a síntese protéica é controlada por processos pós-transcricionais. Genes codificantes de proteína com diferentes funções tem que ser separados co-transcricionalmente por trans-splicing na terminação 5' e poliadenzilado na terminação 3'. Várias proteínas são essenciais para esse processo incluindo a classe das poly(A)-binding proteins (PABP). Essa é a principal proteína citoplasmática que liga mRNA e também participa da poliadenoilação de transcritos nucleares. Estudos recentes a relacionam com o início da tradução, mRNA turnover e interação com o CAP estabilizando o mRNA (1). Nesse trabalho foi caracterizada celular a PABP1 de *T. brucei*. O silenciamento do gene pabp foi realizado através de RNA de interferência revelando que a ausência da proteína é letal para o parasita. Sua localização subcelular foi avaliada por imunofluorescência em condições naturais e sob estresse tradicional. Experimentos utilizando o RNA total celular após silenciamento do gene pabp indicaram seu envolvimento direto com o mecanismo de splicing nos permitindo inferir sobre seu papel essencial no processo celular de splicing e trânsito do mRNA entre núcleo e citoplasma.

Palavras-chave: *Kinetoplastida*. Poly(A)-binding protein. Splicing.

Referências

1 GUNNAR, M. et al. A new twist in trypanosome RNA metabolism: cis-splicing of pre-mRNA. *RNA*, v. 6, n. 2, p. 163-9, Feb. 2000.

PG-172A - Caracterização química e morfológica do bagaço de cana-de-açúcar submetido a diferentes condições de deslignificação para uma maior eficiência durante a hidrólise enzimática

LIMA, Marisa Aparecida de¹; REZENDE, Camila Alves¹; AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de¹; POLIKARPOV, Igor¹

marisalima@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Nos últimos anos, o conceito de biorefinaria tem sido amplamente aplicado nos processos de conversão da biomassa lignocelulósica, para geração de multi-produtos, como o etanol e outros biomateriais. Neste cenário, as tecnologias de pré-tratamento, responsáveis pelo fracionamento da biomassa, tornam-se essenciais para garantir o sucesso da utilização do bagaço de cana-de-açúcar como matéria prima para produção de etanol. Neste trabalho, investigamos as modificações na morfologia e composição química do bagaço de cana submetido duas etapas consecutivas de pré-tratamento, a primeira delas com ácido diluído para remoção das hemiceluloses, seguido por um processo de deslignificação com crescentes concentrações de hidróxido de sódio. As amostras obtidas após as diferentes condições de pré-tratamento foram caracterizada quanto à sua composição química através de hidrólise ácida total, DRIFT e RMN em estado sólido; foram avaliadas também as alterações na morfologia (MEV) e cristalinidade (DRX) das amostras, bem como a influência de cada uma dessas variáveis na digestibilidade enzimática do bagaço. As análises químicas mostraram que os métodos utilizados removeram até 96% e 85% das frações hemicelulose e lignina, respectivamente, quando a concentração de 1% de NaOH foi aplicada, resultando em uma eficiência de hidrólise de cerca de 100%. Considerando as perdas de celulose ocorridas durante o pré-tratamento (máximo de 30%, dependendo da condição), foi observado um aumento na conversão total da celulose de 22% no bagaço não-tratado para 72,4%. O processo de deslignificação, com consequente aumento na relação celulose/lignina, foi claramente observado nos espectros de RMN e DRIFT. As análises de microscopia também demonstraram uma desorganização significativa e gradual na estrutura das fibras de celulose em função da remoção da lignina, com aumento na porosidade e perda de resistência, o que aliado a perda de cristalinidade das amostras, justificam a maior eficiência de hidrólise encontrada.

Palavras-chave: Bagaço de cana-de-açúcar. Pré-tratamento. Bioetanol.

Referências

- 1 ZHANG, Y. P.; LYND, L. R. Toward an aggregated understanding of enzymatic hydrolysis of cellulose: noncomplexed cellulose system. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 88, n. 7, p. 797-824, 2004.
- 2 BALAT, M. Production of bioethanol from lignocellulosic materials via the biochemical pathway: a review. **Energy Convers and Manage**, v. 52, n. 2, p. 858-875, 2011.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 KUMAR, P.; BARRETT, D. M.; DELWICHE, M. J.; STROEVE, P. Methods for pretreatment of lignocellulosic biomass for efficient hydrolysis and biofuel production. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 8, p. 3713-3729, 2009.

PG-173A - Domínios de reconhecimento de carboidratos desempenham diferentes papéis na função de Galectinas

KUMAGAI, Patricia Suemy¹; DYSZY, Fábio Henrique¹; NONATO, Maria Cristina²; BARUFFI, Marcelo Dias²; COSTA FILHO, Antonio José da³
patrickasuemy@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo

³ Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo

As galectinas são uma família de lectinas animais que possui afinidade específica por β -galactosideos e tem sido foco das atenções nos últimos tempos devido ao seu envolvimento em inúmeros processos biológicos tais como inflamação, adesão celular e metástase (1). Nestes processos, muitas questões ainda não são entendidas, incluindo o mecanismo de interação com diferentes carboidratos. A galectina-4 (Gal-4) é uma galectina do tipo ‘tandem-repeat’ e possui dois domínios de reconhecimento de carboidratos (CRD-I e CRD-II) conectados por um peptídeo de ligação (2). Neste trabalho, realizamos análises espectroscópicas de ambos os domínios de reconhecimento de carboidratos da galectina-4 humana, bem como da Gal-4 como um todo. Nossos objetivos principais foram: monitorar as mudanças conformacionais de cada domínio na ausência e na presença de seus principais ligantes e correlacionar as mudanças observadas com as diferenças estruturais entre os CRDs; e investigar as interações entre os CRDs com modelos de membranas lipídicas. Para alcançar tais objetivos, utilizamos as técnicas espectroscópias de Dicroísmo Circular e Ressonância Magnética Eletrônica. Os resultados obtidos até o momento mostram que os domínios CRD-I e CRD-II possuem comportamentos distintos em termos de reconhecimento de carboidratos e de ligação com membranas. Esta diferença pode estar relacionada com diferenças específicas em suas estruturas e, certamente, sugere um papel não-equivalente na função da proteína.

Palavras-chave: Galectina. Carboidratos. Modelos de membrana.

Referências

- 1 COOPER, D.N.W. Galectinomics: finding themes in complexity. **Biochimica et Biophysica Acta**, v.1572, n.2-3, p.209-231, 2002.
- 2 ODA, Y.; HERRMANN, J.; GITT, M.A.; TURCK, C.W.; BURLINGAME, A.L.; BARONDES, S.H.; LEFFLER, H., Soluble lactose-binding lectin from rat intestine with two different carbohydrate-binding domains in the same peptide chain. **Journal of Biological Chemistry**, v.268, n.8, p.5929-5939, 1993.

PG-173B - Carbohydrate recognition domains play different roles in Galectin function

KUMAGAI, Patricia Suemy¹; DYSZY, Fábio Henrique¹; NONATO, Maria Cristina²; BARUFFI, Marcelo Dias²; COSTA FILHO, Antonio José da³

patricia.suemy@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo

³ Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo

Galectins are a family of animal lectins that specifically bind β -galactosides and have gained much attention due to their involvement in numerous biologic processes such as inflammation, cell adhesion and metastasis. In such processes, several issues are still not clear including the mechanisms of interaction with different carbohydrates. Galectin-4 (Gal-4) is a tandem-repeat type galectin that contains two carbohydrate recognition domains (CRD-I and CRD-II) connected by a linking peptide. In this study, we performed spectroscopic studies of the carbohydrate-recognition domains from human Gal-4. Our goals are two-fold: (1) to monitor conformational changes in each domain upon its binding to specific ligands and then to correlate the observed changes with structural differences between the CRDs, and (2) to investigate the interaction between the CRDs and lipid model membranes. To achieve such objectives we used a combined approach of spectroscopic techniques involving Circular Dichroism and Electron Spin Resonance. Overall the results obtained so far show that CRD-I and CRD-II have distinct behaviors in terms of carbohydrate recognition and membrane binding. This may be due to specific differences in their structures and certainly suggests a non-equivalent role in protein function.

Keywords: Galectin. Carbohydrate. Membrane models.

Referências

1 COOPER, D.N.W. Galectinomics: finding themes in complexity. **Biochimica et Biophysica Acta**, v.1572, n.2-3, p.209-231, 2002.

2 ODA, Y.; HERRMANN, J.; GITT, M.A.; TURCK, C.W.; BURLINGAME, A.L.; BARONDES, S.H.; LEFFLER, H. Soluble lactose-binding lectin from rat intestine with two different carbohydrate-binding domains in the same peptide chain. **Journal of Biological Chemistry**, v.268, n.8, p.5929-5939, 1993.

PG-174A - Estudos integrados de biologia molecular e estrutural da proteína fascina: um importante alvo molecular para o desenvolvimento de novos fármacos anticâncer

SANTOS, Ricardo Nascimento dos¹; DUARTE, Simone Michelan¹; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho¹; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

¹ rnsantos@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Câncer é a denominação para um grupo de doenças devastadoras caracterizadas pelo crescimento e multiplicação descontrolados de células malignas, capazes de invadir estruturas próximas e se espalharem em diversas regiões do organismo (1). A metástase celular é um dos principais fatores da alta mortalidade da doença (2, 3). A proteína fascina é um alvo molecular atrativo para a modulação do processo de metástase (4). A fascina liga-se a filamentos de actina enovelando-os em complexos filamentosos que possuem função central na formação de estruturas celulares envolvidas no processo de migração e metástase (5). Nesse trabalho, a proteína fascina foi clonada, expressa, purificada e cristalizada para a determinação da estrutura 3D. O gene da fascina foi planejado, adquirido e inserido em um vetor de expressão pGEX 4T1 (4). A proteína foi expressa em *E. coli* BL21 e isolada através de estratégias cromatográficas que envolveram: (i) purificação por afinidade e (ii) exclusão molecular. O processo de purificação foi bem sucedido (pureza > 95%) com rendimento de 15 mg/L de cultura. A triagem de condições de cristalização levou à identificação de condições promissoras para a cristalização que foram otimizadas para a obtenção de cristais de alta qualidade. Um conjunto de dados do melhor cristal obtido foi coletado à 2.5 Å de resolução. Os dados cristalográficos foram processados com estatísticas favoráveis: completeza de 98.5%, I/sigma médio=11.0, Rmerge=0.085. O método de substituição molecular foi utilizado para a obtenção de um modelo cristalográfico da fascina. O desenvolvimento de um sistema de expressão robusto associado a um protocolo eficiente e reprodutivo de purificação permitiu a obtenção de cristais de fascina com qualidade satisfatória que difrataram a 2,5 Å de resolução. Novos experimentos estão em andamento para melhorar a qualidade dos cristais. Os dados estruturais da fascina integrados com as técnicas modernas em química medicinal permitirão a identificação e planejamento de novos fármacos anticâncer.

Palavras-chave: Câncer. Metástase. Fascina.

Referências

1 WHO HEALTH ORGANIZATION. **Cancer**. Disponível em:
<<http://www.who.int/topics/cancer/en/>>. Acesso em: 01 jun. 2011.

2 CHAMBERS, A.F.; GROOM, A.C.; MACDONALD, I.C. Dissemination and growth of cancer cells in metastatic sites. **Nature Reviews Cancer**, v.2, n. 8, p.563-572, 2002.

3 SANTOS, R.N.; GUIDO, R.V.; OLIVA, G.; DIAS, L.C.; ANDRICOPULO, A.D. Quantitative

structure-activity studies on a series of migrastatin analogs as inhibitors of cancer cell metastasis. **Medicinal Chemistry**, v.7, n.3, p.155-64, May 2011. DOI: 1573-4064/11.

4 CHEN, L.; YANG, S.; JAKONCIC, J.; ZHANG, J.J.; HUANG, X. Migrastatin analogues target fascin to block tumour metastasis. **Nature**, v.464, n.7359, p.1062-1066, 2011. DOI:10.1038/nature10281.

5 ADAMS, J.C. Roles of fascin in cell adhesion and motility. **Current Opinion in Cell Biology**, v.16, n.5, p.590-596, Oct.2004.

PG-175A - Avaliação do efeito fotodinâmico a partir da associação de diferentes fotossensibilizadores

FERRAZ, Ruy Carvalho Mattosinho de Castro¹; KURACHI, Cristina¹

ruyferraz@ursa.ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

OALA é um composto hidrofílico em pH fisiológico, por isso possui uma capacidade limitada de atravessar barreiras biológicas da pele, como membranas celulares, no entanto possui uma alta eficiência na produção de protoporfirina IX. Enquanto que Metil-ALA possui caráter lipofílico e assim é transportado por aminoácidos apolares através da difusão passiva (mecanismo que não necessita de energia) facilitando a capacidade de atravessar as barreiras biológicas atingindo maiores penetrações no tecido desejado, porém, a produção de protoporfirina IX não é tão expressiva como é observado no caso do ALA. A associação destes dois compostos na mesma aplicação tem como possibilidade resultados mais satisfatórios na aplicação da Terapia Fotodinâmica. Essa técnica já pode ser considerada mundialmente uma das terapias mais recomendadas no tratamento de alguns tipos de câncer de pele, sendo fortemente indicada a aplicação de agentes fotossensíveis de uso tópico, como por exemplo, ALA e Metil-ALA, cada qual com seus parâmetros de eficiência. A proposta inovadora deste trabalho é utilização de uma mistura de foto-precursores (ALA e Metil-ALA) na mesma aplicação e assim avaliar a produção de protoporfirina IX e também as consequências no tecido irradiado após a terapia fotodinâmica. A relevância desta análise é avaliar a existência de necrose mais homogênea e intensa (devido ao ALA) e de maior alcance no tecido biológico (devido ao Metil-ALA). Essa pesquisa é potencializada devido a possibilidade de experimentos *in vitro* e *in vivo* como modelo animal com suínos, uma vez que estes possuem o tecido epitelial muito similar à pele humana (1).

Palavras-chave: Terapia fotodinâmica. Fotossensibilizadores. Modelo animal.

Referências

- 1 STEINBAUER, J. Phototoxic reactions in healthy volunteers following photodynamic therapy with methylaminolevulinate cream or with cream containing 5-aminolevulinic acid: a phase II, randomized study. **Photodermatology Photoimmunology & Photomedicine**, v.25, n.5, p.270-275, 2009.

PG-176A - Produção, purificação e caracterização molecular e estrutural da endoglucanase do fungo *Trichoderma harzianum*

PELLEGRINI, V. O. A.¹; SILVA, F. H.²; POLIKARPOV, I.¹

varnoldi@yahoo.com.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Departamento de Genética - Universidade Federal de São Carlos

O aumento na demanda mundial por energia, o advento da tecnologia flex fuel para automóveis, a instabilidade nos preços do petróleo, a perspectiva de encolhimento dos recursos energéticos aliados com a crescente preocupação com a questão ambiental, esboçam o quadro pela busca por fontes alternativas de energia. Se as usinas sucroalcooleiras utilizassem não somente o caldo, mas também o bagaço da cana como fonte de carboidratos, seria possível aumentar significativamente a produção de etanol sem aumentar a demanda por uma maior área de plantio da cana (1). A barreira a ser vencida, portanto é transformar a celulose, que está no bagaço (e também na palha), em álcool combustível. O fungo celulolítico filamentoso *Trichoderma harzianum*, recentemente foi descrito com alta atividade celulolítica (2). Desta forma, temos como objetivo a otimização da produção das enzimas do complexo celulolítico do fungo *T. harzianum* visando caracterização bioquímica, genética, molecular e estrutural, a fim de melhor compreender os mecanismos envolvidos na transformação enzimática da biomassa (principalmente do bagaço da cana-de-açúcar), o substrato promissor para produção de bioetanol da segunda geração.

Palavras-chave: Etanol de segunda geração. Endoglucanase. Expressão de proteína.

Referências

- 1 BASTOS, V. D. Etanol, alcoolquímica e biorrefinarias. **BNDES Setorial**, Rio de Janeiro, n. 25, p. 5-38, mar. 2007.
- 2 CASTRO, A. M. **Produção e propriedades de celulases de fungos filamentosos, obtidas a partir de celulignina de bagaço de cana-de açúcar (*Saccharum spp.*)**. 2006. 217 p. Dissertação (Mestrado em Ciências - opção: Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2006.

PG-177A - Expressão heteróloga de celulases em *Aspergillus niger*

SERPA, Viviane¹; TSANG, Adrian²; POLIKARPOV, Igor¹

viviserpa@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Centre for Structural and Functional Genomics - Concordia University

O uso do bioetanol a partir de matéria prima renovável representa uma alternativa como fonte de energia. Contudo, para que seja possível a utilização da biomassa é necessária a degradação das moléculas da parede celular a açúcares fermentescíveis, o que se dá pela atuação de um coquetel de enzimas celulolíticas e proteínas auxiliadoras. A expressão dessas proteínas eucarióticas para fins de caracterização e, ainda, produção em larga escala para aplicação industrial, enfrenta desafios como baixo rendimento e correta maturação das proteínas que exigem modificação pós-traducional. Fungo filamentoso tem sido uma boa estratégia para obtenção de sucesso nesse processo e, entre diversas opções, o gênero *Aspergillus* tem sido amplamente utilizado. Entre as vantagens apresentadas merece destaque sua alta capacidade de secreção (1-3). O objetivo desse projeto é expressar celulases de fungos do gênero *Trichoderma* para posterior caracterização bioquímica, biofísica e estrutural. Foram expressas as enzimas Endoglucanase I (EGLI), Cellobiohydrolase I (CBHI) e Cellobiohydrolase II (CBHII) de *T. harzianum* e Endoglucanase II (EGLII) de *T. reesei*. Os domínios catalíticos da EGLI e CBHI e o módulo de ligação à celulose (CBM) da EGLII também foram expressos independentes. As sequências de DNA foram amplificadas a partir de biblioteca de cDNA e subclonadas no vetor de expressão ANIp7G (4) pelas técnicas de Gateway® e LIC (Ligation Independent Cloning) com adição de sequência de DNA que codifica uma cauda de 6 histidinas na porção carboxi-terminal da proteína recombinante traduzida. A estratégia de clonagem insere o gene a ser expresso sob controle do promotor induzido, por maltose, da glucoamilase A (PglA). O vetor de expressão foi transformado em protoplastos de *A. niger*, cepa py11. Os transformantes foram selecionados de acordo com o marcador de auxotrofia para uridina e um teste de expressão foi realizado em meio MMJ (meio mínimo suplementado com 15% de maltose). As proteínas foram expressas em concentrações em torno de 20 mg/L e tiveram suas identidades confirmadas por espectrometria de massa.

Palavras-chave: Celulases. Expressão heteróloga. *Aspergillus niger*.

Referências

- 1 LUBERTOZZI, D.; KEASLING, J. D. Developing *Aspergillus* as a host for heterologous expression. **Biotechnology Advances**, v. 27, n.1, p. 53-75, 2009. DOI:10.1016/j.biotechadv.2008.09.001
- 2 FLEISSNER, A.; DERSCH, P. Expression and export: recombinant protein production systems for *Aspergillus*. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 87, n.4, p.1255-1270, 2010.
- 3 KNIEMEYER, O. Proteomics of eukaryotic microorganisms: the medically and

biotechnologically important fungal genus *Aspergillus*. **Proteomics**, v.11, n.15, p.3232-3243, 2011. DOI:10.1002/pmic.201100087.

4 STORMS, R.; ZHENG, Y.; LI, H. S.; SILLAOTS, S.; MARTINEZ-PEREZ, A.; TSANG, A. Plasmid vectors for protein production, gene expression and molecular manipulations in *Aspergillus niger*. **Plasmid**, v. 53, n.3, p.91-204, 2005.

PG-178A - Triagem biológica de galatos de alquila na identificação de inibidores de metástase em células de câncer de mama

ALTEI, Wanessa Fernanda¹; REGASINI, Luis Octavio²; BOLZANI, Vanderlan da Silva²; ANDRICOPULO, Adriano Defini¹

wanaltei@yahoo.com.br;

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Instituto de Química de Araraquara - Universidade Estadual Paulista

A migração celular é um processo envolvido em eventos fisiológicos normais, como o movimento dos linfócitos sanguíneos, mas que também pode estar associada ao estado de doença, como é o caso de células cancerígenas que adquirem a capacidade de migração e invasão, tornando-se metastáticas (1). Ensaios in vitro, como o wound healing (WH) (2) e os ensaios de inibição de migração e invasão celular em câmara de Boyden (3) têm se mostrado versáteis na caracterização de estruturas capazes de alterar a mobilidade celular sendo amplamente empregados na pesquisa por novos agentes antitumorais. Neste trabalho, duas séries de galatos de alquila foram avaliadas quanto à sua capacidade de inibição da migração celular em linhagem tumoral MDA-MB-231 de câncer de mama, utilizando o ensaio WH. Nesse ensaio, as células são plaqueadas em placas de 24 poços (1,0 x 105 cels./poço), e após o crescimento adequado (80-90% de confluência), o meio de cultura é retirado e, com o auxílio de uma ponteira estéril, uma “ferida” é criada na monocamada celular. O composto teste é solubilizado em meio de cultura e adicionado à monocamada com a “ferida”. A inibição é avaliada comparando-se a área dessa “ferida” no tempo 0h e 22h por meio da análise de fotomicrografias. Uma avaliação inicial dos compostos em concentração única foi realizada para a observação qualitativa do efeito sobre as células, e aqueles capazes de inibir a migração celular em ao menos 50% foram submetidos à ensaios WH semi-quantitativos. O aumento da cadeia alquílica das estruturas exerceu um efeito positivo na atividade, sugerindo que o grau de lipofilia pode estar associado à capacidade de inibição da migração celular. Também foi observada uma diferença na atividade entre os ácidos gálico e protocatecuico, sugerindo a importância da hidroxila na posição 5 do anel benzênico para a atividade. Com base nesses resultados, estão sendo realizados estudos para o planejamento racional de novos inibidores da migração celular. Esses dados confirmam a eficácia do método de WH na identificação de compostos bioativos em busca por novos agentes antitumorais.

Palavras-chave: Câncer. Metástase. Ensaios celulares.

Referências

- 1 COUGHLIN, C.; MURRAY, G. I. Current and emerging concepts in tumour metastasis. *Journal of Pathology*, v. 222, n.1, p.1-15, Sept.2010.
- 2 YUE, P. Y. K.; LEUNG, E. P. Y.; MAK, N. K.; WONG, R. N. S. A simplified method for quantifying cell migration/wound healing in 96-well plates. *Journal of Biomolecular Screening*, v. 15, n.4, p. 427-433, 2010. DOI: 10.1177/1087057110361772.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 SHAN, D. D.; CHEN, L.; NJARDARSON, J. T.; GAUL, C.; MA, X. J.; DANISHEFSKY, S. J.; HUANG, X. Y. Synthetic analogues of migrastatin that inhibit mammary tumor metastasis in mice. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v.102, n.10, p.3772-3776, 2005.

PG-179A - Estudo estrutural da proteína “Old Yellow Enzyme” de *Trypanosoma cruzi*

RODRIGUES, Nathalia de Campos¹; CANDURI, Fernanda²; OLIVA, Glaucius¹; BORGES, Júlio César².

nathdecampos@gmail.com

¹ Grupo de Cristalografia - Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

² Lab. de Biologia Molecular e Bioquímica - Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo

A doença de Chagas é uma das doenças tropicais negligenciadas causadas por tripanossomatídeos, resultante da infecção pelo protozoário parasito hemoflagelado *Trypanosoma cruzi*, tendo insetos triatomíneos como vetores. A proteína “Old Yellow Enzyme” de *T. cruzi* (TcOYE) catalisa a síntese de prostaglandina F2 α assim como a redução de vários compostos utilizados no tratamento da doença de Chagas ocasionando a formação de radicais livres que podem ocasionar a morte do parasito. A importância da TcOYE pode ser demonstrada pelo fato da resistência ao benzimidazol estar relacionada à deleção de cópias de genes desta enzima. O DNA codificador da TcOYE foi amplificado a partir do DNA genômico de *T. cruzi* e clonado no vetor de expressão pET28a. A proteína recombinante foi expressa solúvel em células *Escherichia coli* BL21(DE3) e purificada por cromatografia de afinidade ao níquel e gel filtração preparativa após a clivagem da cauda da poli-histidina com trombina. Ensaios de cristalização da TcOYE foram realizados e os cristais obtidos difrataram raios X com resolução menor que 2 Å. Estes cristais serão submetidos à difração por raios X no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). Cristais da TcOYE na presença de ligantes também serão submetidos à difração de raios X. Tais experimentos visam contribuir na elucidação do papel desta enzima no parasita e de sua interação com tais inibidores.

Palavras-chave: *Trypanosoma cruzi*. Old Yellow Enzyme. Cristalografia de proteínas.

Referências:

- 1 Yamaguchi, K., et al. Structure of the inhibitor complex of old yellow enzyme from *Trypanosoma cruzi*. **Journal of Synchrotron Radiation**, v. 18, n. 1, p. 66-69, 2011.
- 2 Murta, S.M.F., et al. Deletion of copies of the gene encoding old yellow enzyme (TcOYE), a NAD(P)H flavin oxidoreductase, associates with in vitro-induced benzimidazole resistance in *Trypanosoma cruzi*. **Molecular & Biochemical Parasitology**, v. 146, n. 2, p. 151-162. 2006.
- 3 Kubata, B.K., et al. A key role for old yellow enzyme in the metabolism of drugs by *Trypanosoma cruzi*. **Journal of Experimental Medicine**, v.199, n. 9, p. 1241-1251, 2002.
DOI:10.1084/jem.20020885

PG-180A - Isoenzimas de *Streptomyces clavuligerus* envolvidas na biossíntese de ácido clavulânico: uma abordagem estrutural e funcional

VIEIRA, Débora Fernanda¹; ARAUJO, Ana Paula U. de¹

deborafv@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos (IFSC)/USP, São Carlos, SP.

Ácido clavulânico (AC) é um potente inibidor de β -lactamases produzido por *Streptomyces clavuligerus*. Os passos iniciais da biossíntese de AC são conhecidos (1) sendo a primeira reação catalisada pela enzima *N*²-(2-carboxietil) arginina sintase (CEAS) envolvida na condensação de D-gliceraldeído-3-fosfato (DG3P) com L-arginina para formar o produto *N*²-(2-carboxietil) arginina. Já o terceiro passo da biossíntese de AC (2) envolve a enzima proclavaminato amidino hidrolase (PAH), também essencial na produção do AC. Recentemente (3, 4) os genes de *ceas1* e *pah1* (genes parálogos de *ceas* e *pah*) foram identificados e relacionados com a biossíntese de AC, porém ainda não há relato na literatura de estudos com seus produtos protéicos. Aqui apresentamos os primeiros estudos estruturais e de atividade com as proteínas CEAS1 e PAH1. Os genes *pah1* e *ceas1* foram isolados do DNA genômico de *S. clavuligerus* e superexpressos em *E. coli*. As proteínas recombinantes foram purificadas por cromatografia de afinidade e analisadas estruturalmente por: cromatografia de exclusão molecular, gel nativo, espalhamento dinâmico de luz, dicroísmo circular e espectroscopia de fluorescência, e a atividade por Calorimetria de Titulação Isotérmica. Nossos resultados mostram que, em solução, PAH1 e CEAS1 estão como hexâmero e dímero, respectivamente. Além disso, ambas as proteínas mostraram um enovelamento do tipo α/β sendo estáveis até 35°C. Ainda, as proteínas mostraram ser estruturalmente estáveis numa ampla faixa de pH (5,5 a 9,5). Em relação à atividade, PAH1 mostrou-se inativa quando testada com um substrato análogo, e CEAS1 apresentou atividade sob o substrato DG3P, além de mostrar um processo de inibição da reação por produto quando titulado o segundo substrato (L-arginina). No momento também estamos testando cristais de CEAS1 para tentarmos elucidar a estrutura cristalográfica desta proteína. Apoio financeiro: FAPESP.

Referências:

1 KHALEELI, N.; LI, R.; TOWNSEND, C.A. Origin of the β -lactam carbons in clavulanic acid from an unusual thiamine pyrophosphate-mediated reaction. **Journal of the American Chemical Society**, v. 121, p. 9223-9224, 1999.

2 ELSON ,S.W.; BAGGLEY K.H.; DAVISON, M.; FULSTON, M.; NICHOLSON, N.H.; RISBRIDGER G.D.; TYLER, J.W. The identification of three new biosynthetic intermediates and one further biosynthetic enzyme in the clavulanic acid pathway. **Journal of the Chemical Society, Chemical Communications**, n. 15, p. 1212-1214, 1993. DOI: 10.1039/C39930001212

- 3 TAHLAN, K. et al. Two sets of paralogous genes encode the enzymes involved in the early stages of clavulanic acid and clavam metabolite biosynthesis in *Streptomyces clavuligerus*. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 48, n. 3, p. 930-939, 2004.
- 4 JENSEN, S.E. et al. *Streptomyces clavuligerus* has a second copy of the proclavaminate amidinohydrolase gene. **Antimicrobial Agents and Chemotherapy**, v. 48, n. 2, p. 514-520, 2004.

PG-181A - Extraindo características locais e globais de texturas por redes complexas

CASANOVA, Dalcimar¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

dalcimar@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Basicamente uma textura pode ser caracterizada por suas primitivas (micro-texturas) e/ou pelo arranjo espacial dessas primitivas (macro-textura). Logo, a percepção da imagem depende tanto do tamanho quanto do arranjo dessas primitivas. Devido a esta característica, a definição de uma classe de textura deve levar em conta não apenas as suas primitivas isoladamente, mas a relação entre elas e seus vizinhos. Desta forma, Julesz (1) demonstrou que duas texturas não são diferenciadas pela visão humana se as estatísticas de segunda ordem forem idênticas. Consequentemente, a caracterização e identificação de texturas requer uma metodologia capaz de expressar o contexto ao redor de cada pixel, juntando características de textura local e global. Este trabalho propõe uma nova abordagem para representar e caracterizar a relação entre os elementos estruturais da textura usando a teoria de Redes Complexas (2). Para realizar essa tarefa é necessário representar a textura como uma rede complexa, incorporando aos vértices e arestas informações sobre os pixels da imagem e sua vizinhança, seguindo-se por uma análise das características topológicas dessa rede. Neste método, cada pixel da imagem é representado por um vértice no grafo e dois vértices são conectados por uma aresta se a distância euclidiana entre eles não é maior do que um raio r , um peso w também é associado a todos os vértices conectados. Um conjunto de limiares é aplicado sobre o conjunto original de arestas de forma a se obter uma transformação da rede, resultando em um subconjunto de arestas. Para cada nova rede obtida características de grau são extraídas para compor o vetor de características. Essas características podem ser usadas para discriminar as diferentes classes de imagens com uma elevada taxa de sucesso. Resultados experimentais são comparados com métodos tradicionais, como características de primeira ordem, descritores de Fourier, filtros de Gabor, GLCM, DCT, GLDM, descritores de Wavelets, CLBP, LBPV, LTP.

Palavras-chave: Textura. Redes complexas. Grafo.

Referências

- 1 JULESZ, B. Experiments in the visual perception of texture. **Scientific American**, v. 232, n.4, p.34-43, 1975.
- 2 BACKES, A. R.; CASANOVA, D.; BRUNO, O. M. Texture analysis and classification: a complex network-based approach. **Information Sciences**, 2011. In press.

PG-182A - Estudo comparativo da arquitetura dos genomas de *Schistosoma mansoni* e *Schistosoma japonicum* utilizando recursos bioinformáticos

JACINTO, Daniele Santini¹; DEMARCO, Ricardo¹

dsjdani@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O parasita Schistosoma Mansoni é um dos agentes causadores da esquistossomose, sendo prevalente na África, na América Central e do Sul. Acredita-se que o gênero Schistosoma tem origem asiática e que as espécies africanas originaram-se de uma espécie ancestral que migrou para África há aproximadamente 10-19 milhões de anos. Estudos demonstram que as inserções de sequências resultantes dos elementos de transposição, em particular de retrotransposons, podem alterar a expressão gênica dos organismos e influenciar na evolução do genoma e consequentemente das espécies (1-4). Explorando a influência desses elementos nos organismos de Schistosoma Mansoni e Japonicum, estudos recentes sugerem que os retrotransposons non-LTR, SR2 (5) e Pererê 3 (6), contribuíram de forma significativa para a divergência dessas espécies ao apresentarem uma grande expansão em seu número no S. Mansoni que não teve paralelo no S. Japonicum (7). Realizando análises mais detalhadas sobre a inserção desses elementos em regiões codificantes de S. Mansoni, constatamos que essas inserções ocorreram preferencialmente em regiões 5' UTR (24.9%) e regiões abrangendo 5' UTR e ORF (20.40%) de transcritos, ou seja, em regiões reguladoras. Foi analisada a frequência de diferentes trechos dos retrotransposons no genoma e a interpretação desses dados nos permitiu concluir que a distribuição dos trechos do elemento P3 segue o padrão esperado, considerando seu mecanismo de inserção. No caso do SR2, a presença de cópias de elementos não-autônomos exerce uma maior influência sobre a distribuição. Análises filogenéticas utilizando cópias autônomas e não-autônomas de SR2 sugerem a existência de um mecanismo recorrente que permite a geração dessas cópias não-autônomas.

Palavras-chave: *Schistosoma*. Retrotransposons. Bioinformática.

Referências

- 1 PRITHAM, E. J. Transposable elements and factors Influencing their success in eukaryotes. **Journal of Heredity**, Oxford, v. 100, n. 5, p. 648 -655, Sept./Oct. 2009. DOI: 10.1093/jhered/esp065.
- 2 GOODIER, J. L.; KAZAZIAN JUNIOR, H. H. Retrotransposons revisited: the restraint and rehabilitation of parasites. **Cell**, Cambridge, v. 135, n. 1, p. 23-35, Oct. 2008. DOI: 10.1016/j.cell.2008.09.022.
- 3 FESCHOTTE, C. Transposable elements and the evolution of regulatory networks. **Nature Reviews Genetics**, London, v. 9, n. 5, p. 397-405, May 2008. DOI: 10.1038/nrg2337.

4 PRAY, L. Transposons: the jumping genes. **Nature Education**, v. 1, n. 1, 2008. Disponível em: < <http://www.nature.com/scitable/topicpage/transposons-or-jumping-genes-not-junk-dna-1211>>. Acesso em: set. 2011.

5 DREW, A. C.; MINCHELLA, D. J.; KING, L. T.; Rollinson, D.; BRINDLEY, P. J. SR2 elements, non-long terminal repeat retrotransposons of the RTE-1 lineage from the human blood fluke *Schistosoma mansoni*. **Molecular Biology and Evolution**, Cary, v. 16, n. 9, p. 1256-1269, Sept. 1999.

6 DEMARCO, Ricardo; MACHADO, A. A.; BISSON FILHO, A. W.; VERJOVSKI-ALMEIDA, S. Identification of 18 new transcribed retrotransposons in *Schistosoma mansoni*. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, Maryland Heights, v. 333, n. 1, p. 230-240, July 2005. DOI: 10.1016/j.bbrc.2005.05.080.

7 VENANCIO, T. M.; WILSON, R. A.; VERJOVSKI-ALMEIDA, S.; DEMARCO, R. Bursts of transposition from non-long terminal repeat retrotransposon families of the RTE clade in *Schistosoma mansoni*. **International Journal for Parasitology**, Oxford, v. 40, n. 6, p. 743-749, May 2010. DOI: 10.1016/j.ijpara.2009.11.013.

PG-183A - Caracterização de gêneros musicais por redes complexas

CORRÊA, Débora Cristina¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

debcris.cor@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O constante crescimento de dados musicais na Internet tem atraído pesquisas para o desenvolvimento de ferramentas adequadas para analisar, resumir e classificar dados musicais. O objetivo principal de tais ferramentas é extrair informação necessária e compacta para bem representar o conteúdo de banco de dados musicais. Nesse contexto, gêneros musicais são importantes descritores, pois além de serem usados há anos para organizar coleções musicais e refletirem interação entre culturas, resumem características (ou padrões) comuns entre peças musicais. O objetivo principal do trabalho é, portanto, propor uma maneira original e de baixo custo computacional para representar os gêneros musicais. Como mecanismos de representação, redes complexas tem se mostrado ferramentas eficientes para caracterizar e complementar o entendimento de muitos aspectos presentes no cotidiano. A análise de suas características topológicas e estruturais contribuem para uma melhor compreensão das relações, propriedades e características inerentes de objetos de interesse. Portanto, a motivação do projeto está na possibilidade de uma melhor análise das características de um gênero musical e como essas características se relacionam, através do estudo das comunidades e medidas topológicas de uma rede complexa construída com músicas de diferentes gêneros. Exemplos de abordagens anteriores que utilizam redes complexas e detecção de comunidades para representar aspectos musicais são (1-6). Nesse trabalho, são comparadas comunidades obtidas por diferentes algoritmos de agrupamento e medidas de distância, definindo uma abordagem não supervisionada e diferenciada pela inclusão de medidas topológicas na análise dos dados. Cada música é representada por um vetor de probabilidades condicionais das durações das notas presentes na percussão, uma vez que o ritmo é inherentemente adequado para representar os gêneros. Os resultados indicam que o uso de redes complexas podem ser úteis para a análise e discriminação dos gêneros musicais.

Palavras-chave: Gêneros musicais. Redes complexas. Detecção de comunidades.

Referências

- 1 LIU, X. F.; TSE, C. K.; SMALL, M. Complex network structure of musical compositions: algorithmic generation of appealing music. **Physica A**, v. 389, n.1, p.126-132, 2010.
- 2 GLEISER, P. M.; DANON, L. Community structure in jazz. **Advances in Complex Systems**, v. 6, n. 4, p. 565-73,2003. DOI: 10.1142/S0219525903001067.
- 3 PARK, J.; CELMA, O.; KOPPENBERGER, M.; CANO, P.; BULD, J. M. The social network of contemporary popular musicians. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 17, n.7, p.2281-2288, 2007.

4 CANO, P.; CELMA, O.; KOPPENBERGER, M.; BULD, J. M. Topology of music recommendation networks. **Chaos**, v. 16, n. 013107, 2006. DOI: 10.1063/1.2137622.

5 TEITELBAUM, T.; BALENZUELA, P.; CANO, P.; BULD, J. M. Community structures and role detection in music networks. **Chaos**, v.18, n.4, p.043105, 2008. DOI:10.1063/1.2988285.

6 LAMBIOTTE, R.; AUSLOOS, M. On the genre-fication of music: a percolation approach. **European Physical Journal B**, v. 50, n.1-2, p.183-188, 2006.

PG-183B - Finding community structure in music genres networks

CORRÊA, Débora Cristina¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

debcris.cor@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

The constant growing of online music databases has motivated the development of suitable tools in order to analyse, summarize and classify music data. The principal objective of such tools is to properly extract crucial and compact information to represent the music database content. In this context, music genres are particularly interesting descriptors. In addition to being used for years to organize music collections, they represent interplay of cultures and summarize common attributes (or patterns) between songs, which is fundamental for classification purposes. Therefore, the principal aim of this work is to propose an original and low-computational-cost form to suitable represent the music genres. As a somewhat new research area, complex networks have been seen as efficient mechanisms to characterize and complement the understanding of many aspects of every-day life, since their topological and structural features contribute for a better comprehension of relations, properties and essential characteristics of the data. Thus, the project motivation relies on the possibility of a systematic analysis of the properties of a music genre as well as in their relationship, through the study of communities and topological features of music networks. Previous approaches that used complex networks and community detection to represent musical aspects are (1-6). In this work, music networks are built in order to capture community structure of music genres. Different clustering algorithms and distance metrics are compared, establishing an interesting unsupervised framework that uses structural attributes in the data analysis. Each song is represented by a vector with conditional probabilities from the note values present in the percussion track, since we believe that the rhythm of a song is inherently suitable to represent its genre. The results corroborates that complex networks are promising mechanisms to automatically classify the music genres.

Keywords: Musical genres. Complex networks. Community detection.

Referências

- 1 LIU, X. F.; TSE, C. K.; SMALL, M. Complex network structure of musical compositions: algorithmic generation of appealing music. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 389, n.1, p.126-132, 2010.
- 2 GLEISER, P. M.; DANON, L. Community structure in jazz. **Advances in Complex Systems**, v. 6, n. 4, p. 565-73,2003. DOI: 10.1142/S0219525903001067.
- 3 PARK, J.; CELMA, O.; KOPPENBERGER, M.; CANO, P.; BULD, J. M. The social network of contemporary popular musicians. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 17, n.7, p.2281-2288, 2007.

4 CANO, P.; CELMA, O.; KOPPENBERGER, M.; BULD, J. M. Topology of music recommendation networks. **Chaos**, v. 16, n. 013107, 2006. DOI: 10.1063/1.2137622.

5 TEITELBAUM, T.; BALENZUELA, P.; CANO, P.; BULD, J. M. Community structures and role detection in music networks. **Chaos**, v.18, n.4, p.043105, 2008.DOI:10.1063/1.2988285.

6 LAMBIOTTE, R.; AUSLOOS, M. On the genre-fication of music: a percolation approach. **European Physical Journal B**, v. 50, n.1-2, p.183-188, 2006.

PG-184A - Reconhecimento de autoria em textos escritos usando redes complexas

AMANCIO, D. R.¹; ALTMANN, E. G.²; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.¹; COSTA, L. F.¹

diegoraphael@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems - International Max Planck Research School

Muitos atributos de textos escritos podem ser inferidos a partir de análises estatísticas usando conceitos advindos do estudo de redes complexas (1, 2) e sistemas dinâmicos (3). Neste trabalho quantificamos como propriedades topológicas de redes de co-ocorrência de palavras (4) e intermitência (5) dependem do estilo dos autores. Analisando um banco de dados composto de 40 livros de autores que viveram nos séculos XIX e XX, pudemos observar que as medidas que melhor distinguem autores são o skewness da distribuição da intermitência e a média do caminho mínimo (1) entre conceitos. Outros fatores como o coeficiente da lei de Zipf (6) ou betweenness (1) não se mostraram úteis para reconhecer autoria. Também avaliamos a contribuição de cada medida para reconhecer autoria usando 3 algoritmos de aprendizado de máquina (7). A melhor taxa de acerto encontrada foi de 65 % quando combinamos métricas derivadas da análise de redes complexas e sistemas dinâmicos. A partir de uma análise detalhada da interdependência das várias métricas pudemos concluir que os métodos utilizados aqui são complementares por fornecer perspectivas de curta e longa escala em textos, que são úteis para aplicações tais como identificação de palavras chave e recuperação de informação.

Palavras-chave: Reconhecimento de autoria. Redes complexas. Sistemas dinâmicos.

Referências

- 1 COSTA, L. F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; BOAS, P. R. V. Characterization of complex networks: a survey of measurements. **Advances in Physics**, v. 56, n.1, p. 167-242, 2007.
- 2 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.
- 3 ALTMANN, E. G.; PIERREHUMBERT, J. B.; MOTTER, A. E. Niche as a determinant of word fate in online groups. **PLoS ONE**, v. 6, n.5, p.e19009, 2011. DOI:10.1371/journal.pone.0019009.

4 AMANCIO, D.R.; NUNES, M. G. V.; OLIVEIRA JUNIOR, O.N.; PARDO, T.A.S.; ANTIQUEIRA, L.; COSTA, L. F. Using metrics from complex networks to evaluate machine translation. **Physica A**, v. 390, n. 1, p. 131-142, 2011.

5 ALTMANN, E. G.; PIERREHUMBERT, J. B.; MOTTER, A. E. Beyond word frequency: bursts, lulls, and scaling in the temporal distributions of words. **PLoS ONE**, v. 4, n.11, p.e7678, 2009. DOI:10.1371/journal.pone.0007678.

6 ZIPF, G. K. **Human behavior and the principle of least effort**. Boston: Addison-Wesley, 1949. 585 p.

7 BISHOP, C. M. **Pattern recognition and machine learning**. New York: Springer, 2006. 738 p.

PG-185A - Redes complexas geográficas n-dimensionais

SILVA, Filipi Nascimento¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

filipinascimento@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Estudos em redes complexas(1, 2, 3) têm ganhado cada vez mais atenção devido ao seu potencial de representação simples de modelos complexos em diversas áreas de conhecimento(4, 5). Redes complexas são essencialmente grafos, mas destacam-se por apresentarem características de topologia não trivial, ou propriedades especiais nos vértices ou arestas, ou ainda elevado número de arestas e vértices. A obtenção de modelos quantitativos que representem fenômenos reais, observados na natureza, assim como o desenvolvimento de metodologias de caracterização de redes complexas, tornaram-se essenciais para a compreensão e desenvolvimento de pesquisas com essas estruturas. A estrutura topológica de certas redes pode estar acoplada a informações espaciais inerentes do fenômeno ou modelo estudado. Essas redes são chamadas de redes geográficas(ou redes espaciais, onde a distância euclidiana entre vértices possui papel fundamental na descrição de suas conexões. Apesar da maioria das redes espaciais estudadas serem bidimensionais(6), trabalhos com redes tridimensionais (7) apresentaram resultados relevantes, como redes obtidas pela análise da estrutura inerente de canais em sólidos. Entretanto, redes geográficas n-dimensionais (com $n > 3$) foram pouco estudadas apesar de representarem estruturas importantes como potenciais de energia de sólidos. Redes de paisagens de energia potencial(8) (Potential Energy Landscape Networks) são redes complexas espaciais geradas a partir de uma função de potencial de energia $\varphi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ em um espaço euclidiano de dimensão n . A proposta deste trabalho é explorar as possibilidades de estudo de redes complexas geográficas de dimensionalidade arbitrária, iniciando com a aplicação de novas metodologias para a análise de redes de potencial. Entre as possíveis metodologias a serem empregadas destacam-se: a criação de novas métricas, aplicação de métodos estatísticos como PCA e Multidimensional Scaling, assim como o desenvolvimento de softwares de visualização.

Palavras-chave: Redes complexas. Sistemas complexos. Paisagens de energia.

Referências

- 1 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **Siam Review**, v. 45, n. 2, p. 167-256, Jan. 2003.
- 2 ALBERT, R.; BARABASI, A. L. Statistical mechanics of complex networks. **Reviews of Modern Physics**, v. 74, p. 47-97, Jan. 2002.
- 3 STROGATZ, S. H. Exploring complex networks. **Nature**, London, v. 410, p. 268–276, Mar. 2001.
- 4 COSTA, Luciano da F.; OLIVEIRA JR., Osvaldo N.; TRAVIESO, Gonzalo; RODRIGUES, Francisco A.; VILLAS BOAS, Paulino R.; ANTIQUEIRA, Lucas; VIANA, Matheus P.;

- ROCHA, Luis E. C. da. **Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks**: a survey of applications. Disponível em:
<<http://eprintweb.org/S/article/arxiv/0711.3199>>. Acesso em: ago. 2011.
- 5 ALBERT, R.; JEONG H.; BARABASI, A. L. Internet: diameter of the world-wide web. **Nature**, London, v. 401, p. 130–131, Jan. 1999.
- 6 HAGGETT, P.; CHORLEY, R. J. **Network analysis in geography**. London: Edward Arnold, 1969.
- 7 COSTA, L. F.; VIANA M. P.; BELETTI, M. E. Complex channel networks of bone structure. **Applied Physics Letters**, v. 88, n. 033903, 2006. DOI: 10.1063/1.2166473.
- 8 DOYE, J. P. K. Network topology of a potential energy landscape: a static scale-free network. **Physical Review Letters**, v. 88, n. 238701, 2002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.238701.

PG-186A - Tomógrafo de espalhamento compton para estudos da física de solos em ambiente de campo

SCANNAVINO JUNIOR, Francisco de Assis¹; CRUVINEL, Paulo Estevão²

scannavino@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo – USP

² Embrapa Instrumentação Agropecuária - CNPDIA - Universidade de São Paulo – USP

O solo é formado por um conjunto de particulados sólidos de natureza mineral e orgânica, ar e água. O particulado sólido, por variar de tamanho e forma, altera a porosidade, a compactação e a sua densidade, características que representam as condições essenciais de desenvolvimento das raízes das plantas, que é um dos elementos que determinam a produtividade das culturas agrícolas. A tomografia Compton tem sido utilizada para medidas de densidade de solos e de conteúdo de água desde o ano 2000 (1, 2). Este trabalho tem como objetivo desenvolver e construir um tomógrafo de efeito Compton para uso em campo. Este resumo aborda sobre uma ferramenta de simulação do efeito Compton e da realização das primeiras medidas experimentais com este mesmo efeito. Tal ferramenta foi desenvolvida através de um equacionamento de detecção de fôtons Compton que possui variáveis de caráter experimental (3, 4). Através de saídas gráficas, a ferramenta pode avaliar e predizer a contagem dos fôtons Compton. A análise gráfica relaciona a variação dos fôtons espalhados em função do fluxo e energia dos fôtons incidentes, bem como do ângulo Compton. Tal análise auxilia na escolha das melhores condições para os arranjos experimentais que envolvem o uso desta técnica de análise. Os resultados apresentaram uma redução no valor do coeficiente de variação (CV) de 64% para 42% variando-se a energia de incidência dos fôtons de 50 keV para 100 keV, respectivamente. Tal resultado pode ser visualizado em gráficos do tipo polar utilizados para análise da variação angular. As saídas da variação energética e de fluxo de fôtons incidentes são apresentadas na forma de gráficos do tipo semi-logaritmos e lineares, respectivamente. Através das pioneiras medidas laboratoriais Compton foi possível visualizar fotópicos Compton para materiais como a água, álcool etílico, glicerina e algumas amostras de solos agrícolas.

Palavras-chave: Tomografia. Efeito compton. Simulação computacional.

Referências

- 1 CRUVINEL, P. E.; BALOGUN, F. A. Minitomography scanner for agriculture based on dual-energy compton scattering. In: BRAZILIAN SYMPOSIUM ON COMPUTER GRAPHICS AND IMAGE PROCESSING-SIBGRAPI, 13., 2000, Gramado. **Proceedings...** Los Alamitos: IEEE Computer Society, 2000. p.193-199.
- 2 BALOGUN, F. A.; CRUVINEL, P. E. Scattering tomography in soil compaction study. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A**, v. 505, n. 1-2 , p.502-507, 2003.
- 3 CRUVINEL, P. E.; BALOGUN, F. A. Compton scattering tomography for agricultural measurements. **Revista Engenharia Agrícola**, v.26, n. 1, p.151-160, jan./abr. 2006.

PG-187A - Estudo da influência da temperatura no ritmo de padrões em circuitos neuronais simples

PHILIPPSEN, Gisele Strieder¹; PINTO, Reynaldo Daniel¹

gistrieder@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Neste trabalho utilizamos a preparação biológica que consiste em dissecar o sistema nervoso estomatogástrico (STNS) do siri *Callinectes sapidus*. O STNS é constituído por um grupo de quatro gânglios ligados: o par de gânglios comissurais (CoGs), o gânglio esofágico (OG) e o gânglio estomatogástrico (STG) (1). Os gânglios CoGs e OG contém neurônios moduladores que controlam a atividade do STG, que por sua vez, contém os neurônios motores que movimentam os músculos das regiões gástrica e pilórica do estômago do crustáceo por meio de padrões rítmicos (2). O presente trabalho tem como objetivo a análise da influência da temperatura na frequência do ritmo pilórico. Utilizando-se duas perfusões, foi possível variar a temperatura apenas no STG, ao passo que nos demais gânglios do STNS a temperatura foi mantida constante. O ritmo gerado foi monitorado via eletrodo extracelular posicionado no nervo LVN. Resultados preliminares indicam que o aumento da temperatura no STG acarreta redução na frequência do ritmo pilórico, ao contrário do relatado na literatura quando se varia a temperatura do STNS como um todo (3). Na próxima etapa do estudo pretende-se explorar o comportamento da freqüência do ritmo quando variada a temperatura apenas na região do STNS que compreende os gânglios comissurais e esofágico.

Palavras-chave: Gânglio estomatogástrico. Frequência ritmo pilórico. Temperatura.

Referências

- 1 MARDER, E.; BUCHER, D. Understanding circuit dynamics using the stomatogastric nervous system of lobsters and crabs. **Annual Review of Physiology**, v. 69, p. 291-316, 2007. DOI: 10.1146/annurev.physiol.69.031905.161516.
- 2 SELVERSTON, A. I. A neural infrastructure for rhythmic motor patterns. **Cellular and Molecular Neurobiology**, v. 25, n. 2, p. 223-244, 2005.
- 3 TANG, L. S.; GOERITZ, M. L.; CAPLAN, J. S.; TAYLOR, A. L.; FISEK, M.; MARDER, E. Precise temperature compensation of phase in a rhythmic motor pattern. **PloS Biology**, v. 8, n. 8, 2010. DOI: 10.1371/journal.pbio.1000469.

PG-188A - Modelagem de grãos confinados em envólucros utilizando redes complexas e métodos de imagem

RIGO, Gustavo Vrech¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

gvrech@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A formação de arcos – estruturas que promovem a anisotropia de forças dentro de um sistema – acontece corriqueiramente dentro de silos ou maquinaria agrícola, sua formação acaba prejudicando o fluxo de partículas dentro destes sistemas. De uma forma geral, materiais Granulares são conjuntos de partículas discretas, cujos tamanhos e formas variam enormemente, como areia, grãos ou mesmo asteróides num cinturão. Esse tipo de estrutura possui um comportamento coletivo distinto de um sólido único, um líquido ou gás, e esse comportamento não é dedutível apenas do comportamento individual das partículas componentes. Um problema de interesse prático é a mecânica de grãos dentro de silos, é comum a perda pós-colheita devido à problemas de armazenamento de grãos. É corriqueiro ocorrer entupimentos dentro da saída de silos e maquinaria agrícola devido à própria configuração do sistema granular, formando os arcos. O presente trabalho modela os arcos a partir de redes complexas, e a partir da topologia das redes formadas estuda a anisotropia inerente das forças que compõe o sistema. Para tal foram realizados diversos ensaios tomográficos utilizando protótipos de pequeno tamanho – tipicamente 2 a 3 centímetros – contendo diversos tipos de grãos. Cada um destes protótipos foi reconstruído digitalmente utilizando técnicas de visualização tridimensional e a partir da manipulação destas imagens 3D foi possível determinar a rede de forças presente. Nosso próximo objetivo é caracterizar cada uma destas redes tendo como foco determinar qual o padrão de formação de arcos em cada uma delas. O objetivo desde projeto é partindo destes protótipos inferir como grãos se comportam dentro de silos de grande porte utilizando simulações computacionais.

Palavras-chave: Redes complexas. Tomografia de raio X. Métodos de imagem.

Referências

- 1 JAEGERR H.; SHINBROT, T.; UMBANHOWAR, P. Does the granular matter?. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 97, n. 24, p. 12959-12960, 2000.
- 2 ZURIGUEL I.; PUGNALONI, L. A.; GARCIMARTÍN, A.; MAZA, D. Jamming during the discharge of grains from a silo described as a percolating transition. **Physical Review E**, v. 68, n. 3, p. 030301(R), 2003.
- 3 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review**, v. 45, p. 167-256, 2003. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0303516>>. Acesso em: 09 de set. 2011.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

- 4 PETROVIC, A. M.; SIEBERT, J. E.; RIEKE, P. E. Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomographic scanning. **Soil Science Society of America Journal**, v. 46, n. 3, p. 445-450, 1982.

PG-189A - Descritores fractais aplicados a análise de texturas

FLORINDO, João Batista¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

jbflorindo@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho extrai descritores (características) de texturas usando a teoria fractal. Fractais são objetos caracterizados pela auto-similaridade, isto é, em diferentes escalas de observação são encontradas cópias do objeto inteiro apenas submetidas a transformações geométricas afins (1). A medida mais importante de um fractal é a dimensão fractal, que mede o nível de auto-similaridade da estrutura. Embora os objetos do mundo real não sejam fractais propriamente, eles apresentam algum nível de auto-similaridade e assim podem ser aproximados por fractais. Assim a dimensão fractal pode ser estimada para esses objetos e igualmente para suas representações em imagens, por exemplo, através de texturas. Aqui, os descritores são obtidos a partir do valor da dimensão fractal da textura calculado em diferentes níveis de escala (2). A validação da proposta é feita por meio da comparação de desempenho do descriptor com outras abordagens estado-da-arte em tarefas de classificação e segmentação de texturas em bases de dados de referência. O trabalho ainda é aplicado em alguns problemas envolvendo reconhecimento de texturas em botânica e nanotecnologia. Como exemplo de aplicação, em um experimento de classificação da base de texturas UIUCC, os descritores fractais baseados em Wavelets alcançaram 65 % de acerto contra 48 % do método estado-da-arte Gabor wavelets. De um modo geral, os resultados obtidos demonstram que a abordagem proposta é uma ferramenta poderosa nestes tipos de aplicação.

Palavras-chave: Análise de texturas. Geometria fractal. Descritores de textura.

Referências

- 1 MANDELBROT, Benoit. **The fractal geometry of nature**. New York: Freeman, 1975. 460p.
- 2 FLORINDO, João Batista ; BRUNO, Odemir Martinez Enhancing volumetric bouligand-minkowski fractal descriptors through functional data analysis: application to texture classification (to appear). **International Journal of Modern Physics C**, 2011. In press.

PG-190A - Sistema eletrônico integrado de estímulo, monitoramento e aquisição de dados em tempo real para experimentos com o duto óptico da mosca

ALMEIDA, Lirio Onofre Baptista de¹; SLAETS, Jan Frans Willen¹

lirio@ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um equipamento integrado para gerar e sincronizar estímulos visuais, realizar a aquisição de dados dos sinais neurais extracelulares e a monitoração em tempo real para experimentos in vivo em Neurobiofísica. A análise da estrutura temporal dos trens de spikes, gerados por neurônios sob influencia de um estímulo conhecido, é explorada para decifrar a codificação na transmissão de informação, contribuindo para o entendimento do sistema nervoso. A geração de estímulos visuais tem sido uma dificuldade enfrentada para P&D em neurociências, principalmente quando se usa insetos com fotorreceptores de resposta rápida, tais como moscas. Registros das respostas de neurônios da mosca sensíveis a movimentos, indicam que, informações presentes no estímulo também estão contidas nas temporizações das seqüências de spikes emitidos pelos mesmos. O uso de computadores com sistema operacional de tempo real para o controle de hardware dedicado, possibilita o desenvolvimento de instrumentação complexa, robusta e determinística. A utilização destas técnicas, aplicadas ao sistema proposto, permite experimentos com maior capacidade de simulação de condições naturalísticas e o uso de feedback em experimentos de maneira inédita. Parte desta instrumentação está em funcionamento, gerando várias dissertações de mestrado, tese de doutorado e artigos na área de neurobiofísica - neurociência computacional (1-3).

Palavras-chave: Neurobiofísica. Instrumentação eletrônica. Spike.

Referências

1 BAPTISTA, M. A complex biological system: the fly's visual module. **Philosophical Transactions of the Royal Society A**, v. 366, n. 1864, p. 345-57, 2008. DOI: 10.1098/rsta.2007.2093.

2 BAPTISTA, M. Dynamically multilayered visual system of the multifractal fly. **Physical Review Letters**, v. 97, n. 17, p. 178102, 2006.

3 ALMEIDA, L. O. B. VSImG: a high frame rate bitmap based display system for neuroscience research. **Neurocomputing**, v. 74, n. 10, p. 1762-1768, 2011.

PG-191A - Estudo de uma rede complexa integrada da bactéria *Escherichia coli*

ANTIQUEIRA, Lucas¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

lantiq@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A regulação da expressão gênica é predominantemente controlada no nível da transcrição em procariotes. A transcrição é, por sua vez, mediada por um conjunto de fatores de transcrição (transcription factors, TF's). O estado ativo ou inativo dos TF's em células em crescimento é normalmente controlado por sinais alostéricos físico-químicos ou metabólitos, os quais são produzidos na célula ou obtidos do meio ambiente por meio da atividade dos produtos de genes efetores. A fim de se compreender a dinâmica regulatória dos TF's e a sua relação com outros componentes celulares, integrou-se em uma única rede dados sobre interações transcritivas, protéticas e alostéricas (ou equivalentes) que mediam a atividade fisiológica dos TF's na bactéria *Escherichia coli*. Essa integração permitiu que fossem estudados, pela primeira vez em uma bactéria, o relacionamento entre diferentes tipos de interação e o seu papel na mediação da atividade dos TF's. Outliers estruturais e dinâmicos foram identificados na rede integrada, os quais correspondem a reguladores globais de transcrição previamente caracterizados (1). A detecção de outliers engloba o cálculo de um conjunto de medidas de redes seguido de análise de componentes principais, além da avaliação das correlações entre estrutura e dinâmica (2). Mostrou-se que os outliers podem ser separados em reguladores globais específicos a determinadas condições, baseando-se somente nas propriedades da rede. Adicionalmente, verificou-se que os genes outliers são altamente expressos em diferentes condições, o que evidencia o papel global desses genes. Motifs (3) foram também identificados, mostrando que as interações de regulação transcritiva e as interações proteína-proteína são densamente interconectadas. A análise realizada fornece um método geral para que reguladores globais sejam identificados e também mostra a importância da integração de múltiplos tipos de interação em uma única rede.

Palavras-chave: Redes complexas. Integração. Bactéria.

Referências

- 1 FREYRE-GONZALEZ, J. A.; ALONSO-PAVON, J. A.; TREVINO-QUINTANILLA, L. G.; COLLADO-VIDES, J. Functional architecture of *Escherichia coli*: new insights provided by a natural decomposition approach. **Genome Biology**, v. 9, n. 10, p. R154, 2008.
- 2 ANTIQUEIRA, L.; COSTA, L. da F. Structure-dynamics interplay in directed complex networks with border effects. In: WORKSHOP ON COMPLEX NETWORKS, 2., 2010, Rio de Janeiro. **Proceedings...** Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. (Communications in Computer and Information Science, v. 116, p. 46–56).



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 MILO, R.; SHEN-ORR, S.; ITZKOVITZ, S.; KASHTAN, N.; CHKLOVSKII, D.; ALON, U. Network motifs: Simple building blocks of complex networks. **Science**, v. 298, n. 5594, p. 824–827, 2002.

PG-192A - Classificação de patologias na laringe baseada em classificadores

RODRIGUES, Luciene Cavalcanti¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

prof.luciene@fatecriopreto.edu.br

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Visando o diagnóstico de doenças da laringe, os médicos usualmente realizam exames invasivos como a videolaringoscopia e a videoestroboscopia (4). Dessa forma, muitos trabalhos têm sido desenvolvidos no intuito de realizar uma classificação de patologias utilizando-se soluções computacionais baseadas em software, que são menos invasivas e servem como ferramenta para segunda opinião médica. Com o intuito de contribuir para a classificação de vozes saudáveis e patológicas (1) baseado em parâmetros acústicos (2, 3), este trabalho apresenta a aplicação da Transformada Wavelet Discreta (DWT) e classificação de patologias da laringe por medidas de Lacunaridade. Particularmente, uma nova família de DWTs foi especificada e construída para solucionar o problema. Os resultados preliminares com um banco de dados com 151 vozes, sendo 134 vozes normais e 17 edemas mostraram que é possível utilizar a estrutura proposta na classificação das referidas vozes.

Palavras-chave: Wavelets. Patologias na laringe. Classificadores inteligentes.

Referências

- 1 BAKEN, R. J. **Clinical measurement of speech and voice.** San Diego: Singular Publishing Group Inc., 1996.
- 2 DENG, L.; SHAUGHNESSY, D. **Speech processing:** a dynamic and optimization-oriented approach. New York: Dekker, 2003.
- 3 NGOC, T. P. Y.; BADIN, P. Vocal tract acoustic transfer function measurements: further developments and applications. **Journal de Physique IV**, v.4, n. C5, p. 549-552, 1994.
- 4 PARRAGA, A. **Aplicação da transformada wavelet packet na análise e classificação de sinais de vozes patológicas.** 2002. 163 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2002.

PG-193A - Morphlet: uma nova família de transformadas wavelet aplicadas ao processo de conversão de voz

VIEIRA, Lucimar Sasso¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

sassovieira@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho de doutorado apresenta como inovação básica a caracterização das Morphlets que constituem uma nova família de Transformadas Wavelet que foi criada para fins específicos de conversão de voz. Até o presente momento inexiste na literatura o uso da técnica que está sendo proposta para criação da nova família de wavelets assim como o uso da mesma para a finalidade proposta. Os resultados obtidos são motivadores indicando um claro avanço na área.

Palavras-chave: Conversão de voz. Wavelet. Morphlet.

Referências

- 1 VIEIRA, L. S. **Conversão de voz baseada na transformada wavelet.** 2007. 113 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2007.

PG-194A - Filtro de Kalman com redes neurais embarcado em uma FPGA para projeções da Ciência do Solo

LAIA, Marcos Antonio de Matos¹; CRUVINEL, Paulo Estevão¹

marcoslaia@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Pesquisas em ciência do solo têm envolvidos especialistas de várias áreas para caracterizar as propriedades físicas solo com o objetivo de melhorar a qualidade de vida com um melhor aproveitamento do uso de solos e recursos naturais. O estudo dessas propriedades envolve principalmente o transporte da água e solutos, como também, identificar a porosidade e materiais e investigar o crescimento da raiz através de imagens de tomografia computadorizada. As imagens são obtidas de sinais que podem ser perturbados por diferentes fontes de ruídos ou sofrerem erros de arredondamentos dos valores obtidos, que podem levar a um falso diagnóstico na análise das mesmas. O que se propõe é um filtro de Kalman com modelagem baseada em modelo dinâmico baseado na física dos sinais tomográficos, com o objetivo de obter uma melhor qualidade na relação sinal/ruído numa etapa de filtragem realizada antes da reconstrução da imagem. Baseado em modelo físico que separa os componentes da equação de contagem de fótons, esse sistema permite identificar uma melhor medida sem a interferência dos principais ruídos que afetam um sistema de tomografia, como o Poisson, elétrico, mecânico entre outros. O uso de redes neurais é determinante para obter uma melhor estimativa das medidas originais visando obter uma melhor adaptabilidade baseado no comportamento do sistema. Para isso se utilizará de uma técnica de estimativa conjunta em que os pesos da rede serão determinados de forma conjunta com os dados dos sinais. Para uma melhor aplicabilidade e otimização do sistema, o filtro em questão será implementado em linguagem de hardware e embarcado em um sistema de FPGA. O sistema embarcado é um tipo de sistema dedicado a tarefas específicas e possui benefícios como reduzir o custo de fabricação, o tamanho do sistema e o uso de recursos computacionais.

Palavras-chave: Filtro de Kalman. Redes neurais. Sistemas embarcados.

Referências

- 1 LAIA, M. A. M.; LEVADA, A. L. M.; BOTEGA, L. C.; CRUVINEL, P. E.; PEREIRA, M. F. L.; MACEDO, A. A novel model for combining projection and image filtering using Kalman and discrete wavelet transform in computerized tomography. IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTATIONAL SCIENCE AND ENGINEERING, 11., 2008, São Paulo. **Proceedings...** São Paulo: USP, 2008. p. 219-226.
- 2 LAIA, M. A. M.; CRUVINEL, P. E. Evaluation of an embedded unscented Kalman filter for soil tomography. CONFERÊNCIA DE SISTEMAS EMBARCADOS CRÍTICOS,(CBSEC), 2011, São Carlos. **Proceedings...** São Carlos: USP, 2011.



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

3 LAIA, M. A. M.; CRUVINEL, P. E. Filtragem de projeções tomográficas utilizando Kalman discreto e redes neurais. **IEEE América Latina**, v. 6, n.1, p.114-121, 2008.

PG-195A - Caracterização e classificação de texturas baseada na representação por redes complexas de um conjunto de sub-amostragens de imagens

FALVO, Maurício¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

mauricio.falvo@gmail.com

¹Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A representação e caracterização de imagens por meio de redes complexas (1) trouxe uma nova perspectiva na análise de texturas. Entretanto, no reconhecimento de espécies vegetais, há a necessidade e esforços de caracterização de tecidos vegetais tanto em nível macroscópico (2) quanto microscópico (3). Dessa forma, este trabalho busca desenvolver um método para conjugar os conceitos multiescala e de redes complexas, a fim de permitir a melhor caracterização e identificação de texturas. Neste método, em cada amostra de imagem, aplicaram-se os seguintes processos: i)subamostragem em N níveis de cinza; ii)estratificação dos N níveis obtidos (subimagens); iii)representação das subimagens por redes complexas, dado um raio R; iv)limiarização das arestas de conexão, com valores entre os intervalos T_i a T_f (sendo $0 < 1$) em incrementos de T_{inc} (entre $]0,1[$), e; v)extração do grau médio para cada nível de estratificação(os quais foram submetido aos limiares T_i a T_f). O vetor de características obtido para cada amostra é composto por um conjunto de N histogramas de grau médio com $T_{inc}+1$ intervalos. Foram realizados testes com 111 classes de texturas(Brodatz) contendo 16 amostras por classe de 128x128. A classificação por naive-Bayes atingiu uma taxa de 84% de classificação. As etapas iii a v foram baseadas, e estão muito bem descritas, em [4,5]. A contribuição deste trabalho está no estudo de uma abordagem multiescala, ao propor vários níveis de sub-amostragem e a representação e caracterização desses, por meio de redes complexas. Os resultados obtidos sugerem uma forte relação entre: R e os parâmetros de limiarização e N, indicando que as maiores taxas de classificação encontram-se nos baixos níveis de subamostragem e nos pequenos intervalos de T_{inc} .

Palavras-chave: Textura. Redes complexas. Subamostragem.

Referências

- 1 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. **SIAM Review**, v. 45, p. 167-256, 2003. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0303516>>. Acesso em: 09 de set. 2011.
- 2 BACKES, A. R.; BRUNO, O. M. Plant leaf identification using multi-scale fractal dimension. **Lecture Notes in Computer Science**, v. 5716, p. 143-150, 2009. DOI: 10.1007/978-3-642-04146-4_17.
- 3 RAMOS, E.; FERNANDES, D. S. Classification of leaf epidermis microphotographs using texture features. **Ecological Informatics**, v. 4, n. 3, p. 177-181, 2009.

4 CHALUMEAU, T; COSTA, L. da F.; LALIGANT, O.; MERIAUDEAU, F. Complex networks: application for texture characterization and classification. **Electronic Letters on Computer and Image Analysis**, v. 7, n. 3, p.93-100, 2008.

5 BACKES, A. R.; CASANOVA D.; BRUNO, O.M. A complex network-based approach for texture analysis. **Lecture Notes in Computer Science**, v. 6419, p. 354-361, 2010. DOI: 10.1007/978-3-642-16687-7_48.

PG-196A - Estudo da forma, função e expressão gênica em neurociência

MIAZAKI, Mauro¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

mauro@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Durante o desenvolvimento de um neurônio, genes são ativados e desativados, a anatomia vai se moldando e as funcionalidades emergem (1). Estes três componentes influenciam continuamente uns aos outros. O estudo da forma, função e expressão gênica nos neurônios e no cérebro ainda é um tema desafiador e com potencial a ser explorado. Atualmente, o acesso a grandes bases de dados públicas trazem novas oportunidades de investigação a serem exploradas. Assim, com acesso aos dados sobre neurônios biológicos e com conhecimentos para a medição, caracterização e modelagem desses neurônios, o objetivo deste trabalho é investigar a quantificação e a modelagem da expressão gênica, da forma e da função do neurônio e do cérebro. Uma dessas bases públicas exploradas foi o NeuroMorpho, que possui quase 6.000 neurônios segmentados. Estes dados foram caracterizados através de métodos estatísticos e foram analisados pelo conceito de morfoespaço proposto por McGhee (2). Outra base pública explorada foi o Allen Mouse Brain Atlas (3), com imagens de expressão gênica de cérebros de rato. Foi proposta a utilização de um método baseado em diagramas de Voronoi para a comparação da distribuição espacial de densidades de expressão gênica entre genes, com o propósito de encontrar correlações na distribuição. Como similaridades na distribuição espacial de densidades entre genes pode indicar funcionalidade correlacionada, torna-se útil encontrar estas similaridades para indicar promissoras direções de pesquisa sobre interações genéticas. Também foram gerados dados sobre raízes de feijão para o estudo da influência de sua estrutura ramificada na dinâmica de propagação de doenças (4), já que existem doenças que se propagam em neurônios de forma semelhante (5).

Palavras-chave: Visão computacional. Bioinformática. Morfometria.

Referências

- 1 ALBERTS, B.; JOHNSON, A.; WALTER, P. **Biologia molecular da célula.** 4th ed. Porto Alegre: Artmed, 2004. 1584 p.
- 2 MCGHEE, G. R. **The geometry of evolution:** adaptive landscapes and theoretical morphospaces. Cambridge: Cambridge University Press, 2006. 212 p.
- 3 LEIN, E. S. et al. Genome-wide atlas of gene expression in the adult mouse brain. **Nature**, London, v. 445, p. 168-176, 2007.
- 4 NASELL, I. Stochastic models of some endemic infections. **Mathematical Biosciences**, v. 179, n. 1, p. 1-19, 2002.
- 5 LOEWY, A. D. Viruses as transneuronal tracers for defining neural circuits. **Neuroscience & Biobehavioral Reviews**, v. 22, n. 6, p. 679-684, 1998.

PG-197A - Instrumentação em neurobiofísica com peixes de campo elétrico fraco *Gymnotus carapo*

MATIAS, Paulo¹; SLAETS, Jan Frans Willem¹

paulo.matias@usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Peixes elétricos de campo elétrico fraco da espécie *Gymnotus carapo* comunicam-se emitindo pulsos de formato aproximadamente fixo, variando apenas o intervalo entre disparos de acordo com a informação a ser transmitida (1). Esse tipo de codificação simples é bastante similar ao encontrado em diversos sistemas de neurônios conhecidos, o que torna esses animais muito interessantes para o estudo de sistemas de comunicação, propiciando experimentos que envolvem tanto aspectos comportamentais quanto de codificação neural. O desenvolvimento de instrumentação eletrônica e de métodos de processamento de sinais permite a realização de novas variedades de experimento, expandindo os horizontes da pesquisa na área. Foi criado um método para a realização de experimentos *in vivo*, não-invasivos, com dois peixes nadando livremente em um mesmo aquário, utilizando-se duas diferentes técnicas de processamento digital de sinais. A primeira consiste em identificar características individuais presentes no formato dos pulsos de eletrocomunicação de cada peixe por meio de ferramentas como a transformada wavelet complexa de dupla árvore (2) e a máquina de vetores de suporte (3). A segunda técnica utiliza o comportamento de continuidade da amplitude e da fase dos sinais coletados em um conjunto de eletrodos para identificar um pulso com base no pulso anterior emitido pelo mesmo peixe. Como continuidade deste trabalho, será desenvolvida instrumentação eletrônica para a realização de experimentos com retroalimentação *feedback* em tempo real, o que permitirá estudar a existência de mecanismos de JAR (*jamming avoidance response*) (4-5), além dos mecanismos de comunicação social entre indivíduos da espécie. Desta forma, serão realizados experimentos *in vivo* inéditos, com um grau de naturalismo e liberdade de experimentação bastante acima do encontrado atualmente na literatura.

Palavras-chave: Eletrocomunicação. Instrumentação eletrônica. Processamento de sinais.

Referências

- 1 BENNETT, M. V.; GRUNDFEST, H. Electrophysiology of electric organ in *Gymnotus carapo*. **The Journal of General Physiology**, v. 42, n. 5, p. 1067-1104, 1959. DOI: 10.1085/jgp.42.5.1067.
- 2 BAYRAM, I.; SELESNICK, I. On the dual-tree complex wavelet packet and m-band transforms. **IEEE Transactions on Signal Processing**, v. 56, n. 6, p. 2298–2310, 2008. ISSN 1053-587X. DOI: 10.1109/TSP.2007.916129.
- 3 CORTES, C.; VAPNIK, V. Support-vector networks. **Machine Learning**, v. 20, n. 3, p. 273–297, 1995. ISSN 0885-6125. DOI: 10.1007/BF00994018.

4 KAWASAKI, M. Comparative analysis of the jamming avoidance response in African and South American wave-type electric fishes. **Biological Bulletin**, v. 191, n. 1, p. 103–108, 1996. DOI: 10.2307/1543070.

5 CAPURRO, A.; MALTA, C. P. Noise autocorrelation and jamming avoidance performance in pulse type electric fish. **Bulletin of Mathematical Biology**, v. 66, n. 4, p. 885–905, 2004. DOI: 10.1016/j.bulm.2004.02.002.

PG-198A - Interação entre duas dinâmicas em uma rede complexa: atividade neuronal e processos epidêmicos

SILVA, Renato Aparecido Pimentel da¹; VIANA, Matheus Palhares¹; COSTA, Luciano da Fontoura¹

rapsilva@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Exploramos a interação entre atividade neuronal e patologias, tendo como ferramenta a teoria de redes complexas. Para tal, utiliza-se um "modelo geográfico" de grafo, onde uma quantidade n de vértices é aleatoriamente distribuída em uma região do espaço. Conexões entre pares de vértices são estabelecidas sempre que os mesmos estão separados a uma distância menor ou igual a um dado valor R . Vértices e arestas correspondem respectivamente aos neurônios e as sinapses formadas entre os mesmos, e R é determinado de maneira que cada célula estabeleça em média 5 sinapses. O modelo integra-e-dispara (1) é empregado na simulação da atividade neuronal, ao passo que modelos epidêmicos clássicos - ex.: SIR, SIS (2) - são utilizados para a propagação da patologia. A atividade neuronal é promovida através de um potencial externo continuamente aplicado sobre um neurônio escolhido aleatoriamente, até que um estado estacionário, caracterizado pelo número de neurônios disparando, é atingido. No modelo adotado não há atividade inibitória. Promove-se então a epidemia, através da infecção de um neurônio também selecionado de modo aleatório. A doença então se propaga através das sinapses entre diferentes neurônios, sendo que células infectadas têm seu limiar de disparo perturbado, afetando a atividade neuronal global. Neurônios que se recuperam da epidemia têm seu limiar de disparo original restaurado. Alguns resultados preliminares são apresentados, considerando-se a influência da patologia sobre a atividade neuronal. No momento, estudamos como promover a influência da atividade neuronal sobre a epidemia, restringindo, por exemplo a contaminação de acordo com a ativação das células envolvidas. Uma abordagem a ser explorada é considerar o efeito da forma neuronal (3) na conectividade da rede, e sua implicação sobre a interação entre os processos dinâmicos.

Palavras-chave: Redes complexas. Integra-e-dispara. Modelos epidêmicos.

Referências

- 1 HAYKIN, S. **Neural networks: a comprehensive foundation.** 2nd ed. New Jersey: Prentice-Hall, 1998. 842 p.
- 2 KEELING, M. J.; ROHANI, P. **Modeling infectious diseases in humans and animals.** Princeton: Princeton University Press, 2008. 408 p.
- 3 SILVA, R. A. P.; VIANA, M. P.; COSTA, L. F. The effect of host morphology on network characteristics and thermodynamical properties of ising model defined on the network of human pyramidal neurons. In: WORKSHOP ON COMPLEX NETWORKS, (COMPLENET), 2, 2010, Rio de Janeiro. **Proceedings...** Berlin: Springer-Verlag, 2011. p. 96. (Communications in Computer and Information Science, v.116).

PG-199A - Propagação e perdas de energia de raios cósmicos ultra energéticos

ANJOS, Rita de Cássia dos¹; SOUZA, Luiz Vitor de Souza¹

rita@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

A origem e a natureza dos raios cósmicos ultra energéticos ($E > 10^{18}$ eV) é um dos grandes problemas da astrofísica da atualidade. O mecanismo astrofísico que acelera estas partículas é desconhecido e a simples existência de partículas com energia acima de 10^{20} eV representa um enigma para a astrofísica moderna (1). Este trabalho se insere dentro dos esforços de compreensão dos mecanismos de geração de partículas com energia acima de 10^{18} eV. Neste estudo, o caminho da partícula da fonte até a Terra deve ser considerado. Os raios cósmicos interagem com a radiação e matéria no Universo e estas interações alteram as propriedades do jato inicial de partículas, modificando o espectro de energia inicial e a abundância de tipos de partículas. Dados recentes do Observatório Pierre Auger indicam que uma parcela não insignificante das partículas que atingem a Terra são núcleos de átomos pesados. Desta forma, a interação dos núcleos com a radiação eletromagnética de fundo deve ser modelada para que a partir dos dados medidos na Terra possamos inferir a abundância de elementos e o espectro de energia emitidos na fonte. Alguns modelos computacionais baseados em simulação de Monte Carlo fazem a propagação de núcleos no Universo considerando as várias interação relevantes. No entanto, estas simulações são muito custosas do ponto de vista computacional e fazer um estudo estatístico de várias fontes e diferentes modelos de geração se torna praticamente impossível devido ao tempo de simulação necessário (2). Neste trabalho, estudamos e proposmos melhorias em um modelo analítico que descreve a foto-desintegração de núcleos e sua consequente perda de energia, permitindo estudar a composição dos raios cósmicos e sua propagação sem termos que recorrer à morosos modelos computacionais (3).

Palavras-chave: Raios cósmicos. Foto-desintegração. Propagação de núcleos.

Referências

- 1 STECKER, F. W. Effect of photomeson production by the universal radiation field on high-energy cosmic rays. **Physical Review Letters**, v. 21, n. 14, p. 1016-1018, 1968.

PG-200A - Identificação de patologias na laringe com base na Discriminative Paraconsistent Machine (DPM)

BARBON JUNIOR, Sylvio¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

barbon@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Este trabalho de doutorado apresenta duas inovações: a Discriminative Paraconsistent Machine (DPM), que consiste em um novo classificador elaborado com base na lógica paraconsistente anotada (LPA) e a aplicacao da DPM para a identificacao de patologias na laringe, por meio de exames nos sinais de voz de um locutor. Não há relatos na literatura sobre o uso da LPA para a contrução de um classificador e sobre suas aplicações para a finalidade proposta. Os resultados obtidos são motivadores, indicando um avanco na area.

Palavras-chave: Processamento de sinais. Inteligência artificial. DPM.

Referências

1 DUDA, R.; HART, P.E.; STORK; D.G.; **Pattern recognition**. 2nd. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.

PG-200B - Laryngeal pathologies identification based on Discriminative Paraconsistent Machine (DPM)

BARBON JUNIOR, Sylvio¹; GUIDO, Rodrigo Capobianco¹

barbon@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

This PhD thesis presents two novelties: the Discriminative Paraconsistent Machine (DPM), which is a new classifier built on the basis of the annotated paraconsistent logic (LPA), and the applications of DPM to identify larynx pathologies, by inspecting a voice signal. There is neither a comment on literature about the use of PLA to built a classifier nor about its applications for the proposed application. The results obtained create motivation, showing a clear progress in the field.

Keywords: Signal processing. Artificial intelligence. DPM.

Referências

- 1 DUDA, R.; HART, P.E.; STORK; D.G.; **Pattern recognition**. 2nd. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999.

PG-201A – Dimensão fractal de comunidades de pixels aplicada a análise de texturas

GONÇALVES, Wesley Nunes¹; BRUNO, Odemir Martinez¹

wnunes@ursa.ifsc.usp.br

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Análise de textura é uma importante subárea em visão computacional que tem atraído um crescente número de pesquisas. Apesar das intensas pesquisas, não há uma definição formal de textura que seja amplamente aceita na literatura. No entanto, a textura é facilmente compreendida pelo sistema visual humano como um padrão repetido sobre uma superfície em sua forma exata ou com pequenas variações. Embora a capacidade dos seres humanos em discriminar texturas seja evidente, a modelagem automática de texturas provou ser uma tarefa bastante complexa, sendo que a maioria dos métodos existentes não modelam adequadamente padrões de texturas semelhantes. Neste trabalho, nós propomos um método para modelagem de texturas baseado em caminhadas determinísticas (1) e dimensão fractal (2). Neste método, um agente que realiza uma caminhada determinística é iniciado em cada pixel da imagem. Os passos do agente seguem a regra: vá para o pixel mais próximo que não tenha sido visitado nos últimos n passos. Após um tempo de transiente, o agente é aprisionado em um atrator composto por um conjunto de pixels cujas intensidades formam um padrão que o agente não consegue escapar. Após encontrar os atratores da imagem, eles são dilatados até cobrir toda a imagem o qual segue a teoria fractal (2). Para esta dilatação, pixels são adicionados aos atratores de acordo com sua relevância. A relevância de um pixel é calculada através do caminho mínimo entre o pixel e os demais pixels pertencentes aos atratores. O número de pixels adicionados aos atratores a cada passo de dilatação é utilizado para compor um vetor de características que descreve a imagem de textura. A principal vantagem do método proposto é sua habilidade em descrever os atratores, o qual certamente possui mais informações do que apenas o seu tamanho, como utilizado em trabalhos anteriores (1, 3). Utilizando conhecidas bases de imagens, o método proposto demonstrou ser superior aos métodos tradicionais (e.g. descritores de Fourier, matrizes de co-ocorrência e filtros de Gabor), assim como o método caminhada determinística do turista e dimensão fractal multi-escala

Palavras-chave: Análise de texturas. Caminhadas determinísticas. Dimensão fractal.

Referências

- 1 BACKES, A. R.; GONÇALVES, W. N.; MARTINEZ, A. S.; BRUNO, O. M. Texture analysis and classification using deterministic tourist walk. **Pattern Recognition**, v. 43, n. 3, p. 685-694, 2010.
- 2 BRUNO, O. M.; PLOTZE, R. O.; FALVO, M.; CASTRO, M. **Information Science**, v. 178, n. 12, p. 2722-2733, 2008.
- 3 BACKES, A. R.; MARTINEZ, A. S.; BRUNO, O. M. Texture analysis based on maximum contrast walker. **Pattern Recognition Letters**, v. 31, n. 12, p. 1701-1707, 2010.

PG-202A – Precessão de um vórtice tipo linha num condensado de Bose-Einstein

TELES, R. P.¹; DOS SANTOS, F. E. A.²; CARACANHAS, M. A.; BAGNATO, V. S.

rafael.fisica.unesp@gmail.com

¹ Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

² Department of Physics - Freie Universität Berlin

No presente trabalho visamos uma dinâmica de um vórtice num condensado de Bose-Einstein em duas dimensões. Para tanto, usaremos dois métodos: o método variacional e a simulação numérica da equação de Gross-Pitaevskii. Ao utilizar ambos os métodos, queremos comparar o resultado analítico do primeiro com a simulação da própria Gross-Pitaevskii. Desta maneira validamos, tanto quantitativamente quanto qualitativamente, o ansatz utilizado no caso variacional cujo método não permite dissipação de energia. Obtemos assim, a dinâmica do vórtice fora de centro para um condensado num potencial harmônico, e o congelamento de seu movimento de precessão quando o condensado encontra-se em expansão livre.

P203A - Teorias de calibre e teorias integráveis no espaço dos laços

LUCHINI, G.; FERREIRA, L. A.

gabriel.luchini@usp.br

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

Propomos uma formulação integral das equações de movimento de uma grande classe de teorias de campo que leva de uma maneira bastante natural e direta à construção de leis de conservação. Temos como base uma generalização do teorema de Stokes não abeliano para conexões que são p-formas, formulado no espaço dos laços ("loop space"). Essa formulação aplica-se à teorias de campo integráveis em (1+1) dimensões, Chern-Simons em (2+1) dimensões e teorias de calibre não abelianas em (2+1) e (3+1) dimensões. Nossos resultados são importantes para o entendimento de propriedades globais dessas teorias.

Palavras-chave: Teorema de Stokes não abeliano. Espaço dos laços. Teorias de calibre.

Referências

- 1 ALVAREZ, O.; FERREIRA, L. A.; SANCHEZ-GUILLEN, J. Integrable theories and loop spaces: fundamentals, applications and new developments. **International Journal of Modern Physics A**, v. 24, p. 1825, 2009.

P203B - Gauge and integrable theories in loop space

LUCHINI, G.; FERREIRA, L. A.

gabriel.luchini@usp.br

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

We propose an integral formulation of the equations of motion of a large class of field theories which leads in a quite natural and direct way to the construction of conservation laws. The approach is based on generalized non-abelian Stokes theorems for p-form connections, and its appropriate mathematical language is that of loop spaces. The equations of motion are written as the equality of an hyper-volume ordered integral to an hyper-surface ordered integral on the border of that hyper-volume. The approach applies to integrable field theories in (1+1) dimensions, Chern-Simons theories in (2+1) dimensions, and non-abelian gauge theories in (2+1) and (3+1) dimensions. The results presented in this paper are relevant for the understanding of global properties of those theories.

Keywords: Non-abelian Stokes theorem. Loop space. Gauge theories.

References

- 1 ALVAREZ, O.; FERREIRA, L. A.; SANCHEZ-GUILLÉN, J. Integrable theories and loop spaces: fundamentals, applications and new developments. **International Journal of Modern Physics A**, v. 24, p. 1825, 2009.

P204A - Estudo computacional da dependência com a temperatura da solvatação de cadeias laterais de aminoácidos naturais e implicações na termoestabilidade de proteínas

BATISTA, Mariana Raquel Bunoro; MARTINEZ, Leandro

mariana.batista@usp.br

Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo

O estudo de proteínas termofílicas e dos fatores que aumentam a estabilidade de proteínas em condições extremas são de particular interesse pois permitem a compreensão do processo de enovelamento proteíco, além do desenvolvimento estratégico de enzimas com maior termoestabilidade e eficiência catalítica para aplicações industriais (1). Sabe-se, pela análise comparativa de sequências e estruturas que enzimas com atividade ótima em temperaturas elevadas têm, geralmente, muitas pontes salinas e um núcleo hidrofóbico mais compacto. Entretanto, a compreensão sobre os fatores responsáveis pela estabilidade de proteínas termofílicas e hipertermofílicas é, ainda, incompleta (2). Esse trabalho procura compreender o papel da solvatação na estabilidade térmica de proteínas. Para isso, está sendo realizado o estudo da estrutura de solvatação de aminoácidos abundantes na superfície de proteínas termoestáveis em diversas temperaturas usando simulações de dinâmica molecular clássica. A primeira etapa da nossa análise envolve a simulação de pequenos peptideos com sequencia AXA e AAXAA (onde X é um aminoácido eletrostaticamente carregado e A é uma alanina) em solução aquosa. As estruturas de solvatação estão sendo analizadas através de funções de distribuição radiais, $g(r)$ e “funções de distribuição da camada de solvatação”, $g_{ss}(r)$ (3, 4), além de análises energéticas variadas. Posteriormente, pretende-se realizar o cálculo da variação de energia livre associada à mutação de resíduos de mesma carga (Arg por Lys, Glu por Asp) em diferentes temperaturas utilizando a metodologia de perturbação termodinâmica (FEP), buscando compreender se a solvatação preferencial de resíduos de superfície em diferentes temperaturas possui um papel importante na seleção natural destes em proteínas termofílicas.

Palavras-chave: Dinâmica Molecular. Solvatação. Termoestabilidade de proteínas.

Referências

1 HAKI, G. D.; RAKSHIT, S. K. Developments in industrially important thermostable enzymes: a review **Bioresource Technology**, v.89, n.1, p. 17-34, 2003.

2 VOGT, G.; WOELL, S.; ARGOS, P. Protein thermal stability, hydrogen bonds, and ion pairs **Journal of Molecular Biology**, v.269, n.4, p. 631-643, 1997.

3 SONG, W.; BISWAS, R.; MARONCELLI, M. Intermolecular interactions and local density augmentation in supercritical solvation: a survey of simulation and experimental results **Journal of Physical Chemistry A**, v.104, n.30, p. 6924-6939, 2000.

4 PATEL, N.; BISWAS, R.; MARONCELLI, M. Solvation and friction in supercritical fluids: simulations-experiment comparisons in diphenyl polyene/CO₂ systems **Journal of Physical Chemistry B**, v.106, n.28, p. 7096-7117, 2002.



Índice de Autor

ACHILLES, Anja	242, 243
AKIMUSHKIN, Camilo.....	256, 257
ALCARAZ, Francisco Castilho; ALCARAZ, F. C.	87, 90
ALMEIDA, Lirio Onofre Baptista de.....	357, 361
ALTEI, Wanessa Fernanda.....	336
ALTMANN, E. G.	348
AMANCIO, D. R.	348
AMARAL, Thiago Martins	293
AMORIM, Aparecido Donizeti Fernandes de; AMORIN, A. D. F.	130, 222, 289
ANDRADE, Cintia Teles de	155
ANDRADE, Denis O. Vieira de	184
ANDREETA, Mariane Barsi	213
ANDRICOPULO, Adriano Defini; ANDRICOPULO, A.	83, 174, 176, 309, 315, 330, 336
ANJOS, Rita de Cássia dos.....	370
ANTIQUERA, Lucas	358
ANTONELLI, Eduardo	293
ARAUJO, Ana Paula Ulian de	297, 298, 314, 339
ARAUJO-FERREIRA, Arthur Gustavo de	222
ASCONA, Christian Rivera; RIVERA-ASCONA, Christian	270, 291
AZEVEDO, Eduardo Ribeiro de; AZEVEDO, E. R.	103, 116, 139, 242, 243, 277, 288, 326
AZEVEDO, Érika Chang de.....	60
BACHEGA, José Fernando Ruggiero	313
BAGNATO, Guilherme de Guzzi	204
BAGNATO, Vanderelei S.; BAGNATO, V. S; BAGNATO, Vanderlei Salvador	46, 47, 84, 93, 99, 100, 114, 115, 135, 155, 161, 168, 229, 245, 246, 251, 252, 253, 273, 274, 280, 292, 374
BAHIA, Diana	180
BALDACCHINI, Tommaso	258
BALLESTEROS, Camilo Arturo Suárez	151, 152
BARBANO, Emerson Cristiano	131
BARBON JUNIOR, Sylvio	371, 372
BARUFFI, Marcelo Dias.....	328, 329
BATALHÃO, Tiago Barbin	121, 122
BATISTA, F.A.H.	305
BATISTA, Joao Luiz Bunoro	132
BATISTA, Mariana Bunoro	184
BATISTA, Renata da Fonseca Moraes	377
BELLINI, Natália Karla	80
BENDER, Helmar	126, 187
BERNARDES, Amanda	296, 305, 310
BERNARDEZ, Andréa Simone Stucchi de Camargo Alvarez.....	285, 286
BERNARDEZ CAMARGO, Andréa Simone Stucchi de.....	254, 255
BERNARDES, Esmerindo de Sousa	95, 248, 250
BERNARDI, Maria Inês Basso	136
BERNARDINELLI, O. D.	288
BERTÉ, Rodrigo	137
BEZERRA, W. S.	139
BLUNDELL, T.....	316, 318
BOLZANI, Vanderlan da Silva	336
BONAGAMBA, Tito José Bonagamba; BONAGAMBA, T. J.....	116, 139, 213, 222, 270, 271, 289, 291
BONI, Leonardo de	247
BORGES, Ben Hur V.	111
BORGES, J.C.; BORGES, Júlio César.....	162, 163, 316, 318, 338

BORTOLET, Natalia Mayumi Inada	143
BOSCO, Sandra de Moraes Gimenes	168
BOSSOLAN, Nelma Regina Segnini	169, 177
BOTELHO, Moema	285, 286
BOTELHO, Moema de Barros e Silva	254, 255
BRASIL, Carlos Alexandre	224, 226
BRAZ, Daniel Cesar	271
BRAZACA, L. C.	58
BRUNO, Odemir Martinez	197, 202, 214, 341, 356, 364, 373
BUZZA, Hilde Harb; BUZZA, H. H.	84, 161
CABRAL, J. S.; CABRAL, Jader de Souza	108, 237
CAMARA, Amanda Souza	70, 141
CAMARGO, Ilana Lopes Baratella da Cunha; CAMARGO, Ilana L. B. C.	65, 74, 187
CAMILO, César Moisés.....	62, 144
CAMPANI JUNIOR, Gilson	61
CAMPOS, Tiago de	218
CANDIDO, Denis R.	94
CANDURI, Fernanda	338
CARACANHAS, M. A.	245, 246, 374
CARDINALI, Marcelo Camponez do Brasil	133
CARDIM, Danilo Augusto	129
CARVALHO, Camila Miranda	299
CARVALHO, Jesiel Freitas	262
CARVALHO, João Teles de	270
CARUSO, J. S.; TRAVIESO, G.	210
CASANOVA, Dalcimar	341
CASTELO BRANCO, Cora	93
CASTILHO, Patricia	232
CASTRO, Leonardo Andreta de	106, 107
CASTRO NETO, Jarbas Caiado de	131
CATANDI, Patrícia Bongiovanni	49
CAVINI, Ítalo Augusto	63
CENSONI, Luciano Borges	170, 171
CENTURION, Lilian Maria Pessoa da Cruz	281
CHAVES, Anderson Silva	265, 266
CHELESKI, Juliana	67
COBO, M. F.; COBO, Marcio Fernando	139, 242, 243
COLA, L. de	285, 286
COLETTA, V. C.	138
COLUSSI, Francieli	308
COLNAGO, Luiz Alberto	294
COMIN, Cesar Henrique	199
CONCEIÇÃO, F. R.	138
CORRÊA, Débora Cristina	344, 346
CORRER, W. R.	195, 196
COSTA, Luciano da Fontoura; COSTA, L. F.	132, 199, 216, 219, 344, 346, 348, 350, 354, 358, 366, 369
COSTA FILHO, Antonio José da	59, 181, 328, 329
COURTEILLE, Philippe Wilhelm	110
COUTINHO, Douglas José	272
CRUVINEL, Paulo Estevão	352, 362
DALLA-COSTA, Leonardo J.	49
DAMALIO, Julio Cesar Pissuti	314
DA SILVA, Juarez L. F.	50, 51

DE MARCO, Ricardo	166, 297, 298, 342
DERIGGI, Maycou Alberto	180
DE SOUSA NETO, Diógenes de	304, 305
DE SOUZA, Vitor	209
D'EURIDYCE, M. N.	130
DIAS, M. V. B.....	316, 318
DIPOLD, Jessica	45
DOS SANTOS, F. E. A.....	374
DO VALE, Mike	48
DOTTA, Maria Amelia Villela Oliva	157
DUARTE, Simone Michelan.....	330
DYSZY, Fábio; DYSZY, Fábio Henrique.....	181, 328, 329
ECKERT, Hellmut.....	254, 255, 285, 286
EGUES, J. Carlos	94, 97, 244, 248, 250
ELLENA, Javier Alcides; ELLENA, Javier	165, 167, 300
ESCANHOELA JÚNIOR, Carlos Augusto;.....	269
ESCOLA, João Paulo Lemos.....	211
EVANGELISTA, Jaqueline Pesciutti; EVANGELISTA, J.P.	80, 312
ESTRACANHOLLI, Éverton Sérgio	273, 274
FABBRI, Renato	223, 226
FACETO, Angelo Danilo	220, 221
FAIS, Letícia	56, 57
FAIM, Lívia Maria; FAIM, L. M.	162, 163, 316, 318
FALEIROS, Marcelo Meira	54, 55, 282
FALVO, Maurício	364
FARIA, Gregório Couto	277
FARIA, Roberto Mendonça.....	48, 263, 264, 272, 295
FARIA JUNIOR, Paulo Eduardo de.....	215
FERNANDES, E. G. R.	58
FERRAZ, Ruy Carvalho Mattosinho de Castro.....	332
FERREIRA, A. G.	139
FERREIRA, Éden R.	180
FERREIRA, Juliana.....	280
FERREIRA, L. A.	375, 376
FERREIRA, Leonardo Luiz Gomes	315
FERREIRA, Paulo Henrique Dias	247
FERRI, Fábio A.	111
FIGUEIRA, A.C.M.....	315
FIGUEIREDO, Alessandra	140
FLORINDO, João Batista.....	356
FONTANARI, José Fernando	241
FONTES, S. R.	130
FORTULAN, C. A.	130
FU, Jiyong	248, 250
GALAN, D. C.	138
GALLO, Ivan Braga	278, 279
GALVEZ, Maria Dolores	285, 286
GARCIA, Celia R. S.....	306
GARRATT, Richard Charles; GARRATT, R. C.....	63, 73, 145 166, 313,314
GIARD, Jean-Christophe.....	65, 74
GODOI, Leandro Bardiviesso	169
GODOY, André S.....	293
GODOY, Andre Schutzer de	62, 144
GONÇALVES, L.F.; GONÇALVES, Luis Felipe	108, 237

GOMES, Vinicius Tribuzi, R. P.	120
GONÇALVES, Viviane Maimoni	61
GONÇALVES, Wesley Nunes	373
GRATIERI, J.;	305
GRECCO, Clóvis	280, 301
GUARENTO, Rafael Tuma	53
GUALBERTO, Alan Rodrigo Marinhos	293
GUIDO, Rafael V. C; GUIDO, Rafael Victorio Carvalho	306, 330
GUIDO, Rodrigo C.	208
GUIDO, Rodrigo Capobianco	211, 360, 361, 371, 372
GUIMARÃES, Francisco Eduardo Gontijo; GUIMARÃES, F. E. G	48, 138, 140, 220, 221, 275, 287
GUILLEN, Carolina	197
GUTIERREZ, Raissa Ferreira	74
HACHIYA, Marco O.	244
HERNANDES, Antonio Carlos	262, 293
HORNOS, José Eduardo Martinho	235, 236
INNOCENTINI, Guilherme da Costa Pereira	235
JACINTO, Daniele Santini	342
JUSTO, Marina Jeaneth Machicao	214
KALBITZER, Hans Robert	60, 63
KONDO, J. D.	108
KONDO, Jorge D. M.	237, 239
KOBERLE, Roland	153
KUMAGAI, Patricia Suemy	328, 329
KURACHI, Cristina; KURACHI, C.	84, 135, 155, 161, 168, 273, 274, 280, 301, 321, 332
LAIA, Marcos Antonio de Matos	362
LANDGRAFF, Ana Carolina Mafud	178
LEITE, José R. S. A.	137
LEITE, Mariane	176
LENCIONE, Diego	128
LI, Máximo Siu	262
LIBERATO, Marcelo Vizoná	323
LÍBERO, Valter Luiz	118
LIMA, A. L.	75, 324
LIMA, Cesar Augustus Uliana	91, 92
LIMA, Gustavo Machado Alvares de	157
LIMA, José Fernando	59
LIMA, Mariana Zuliani Theodoro de	66
LIMA, Marisa Aparecida de	326
LIMA, W. C. C.	265, 266
LOPES, Victor F. P.	50, 51
LOSS, Daniel	97
LOURENÇO, Gustavo Vilaça	207
LUCHINI, G.	375, 376
MACIEL, Alexandre de Castro	263, 264
MAGALHÃES, D. V.	46, 47
MAGALHÃES, Kilvia Mayre Farias	100, 101, 114, 115, 229, 251
MAGON, Claudio José	200
MAIA, Lauro June Queiroz	262
MAIA, Leonardo Paulo; MAIA, Leonardo P.	88, 89, 240, 256, 257
MAKKI, Raphaela	71, 72
MALUF, Fernando Vasconcelos	306
MANZINE, L. R.; MANZINE, Livia Regina	193, 194, 320



MARANGONI, Valéria Spolon	151, 152
MAREGA JUNIOR, Euclides	111, 231
MARCASSA, Luis Gustavo; MARCASSA, L.G.....	86, 108, 223, 237, 239
MARTINS, Juliana Quintanilha	76, 78
MASCARENHAS, Yvonne Primerano.....	52
MASCARENHAS, Sergio	129
MASTELARO, Valmor Roberto.....	136
MARTIL, D. E.....	302, 324
MARTINEZ, Leandro	159, 160, 377
MARTINS, Renato Juliano	117
MARANGONI, Bruno Spolon	223
MARANGONI, Valéria S.	151, 152, 191, 192
MASTELARO, Valmor Roberto.....	136, 269
MATIAS, Paulo.....	367
MATSUYAMA, Bruno Yasui	147
MAXIMO, Carlos Eduardo	90
MELLO, Bruno Luan	66
MENDES, Alessandra Carla.....	262
MENDES, Luis Felipe Santos	59
MENDES, Tereza Cristina da Rocha	36, 37
MENDONÇA, Cleber Renato	117, 120, 183, 247, 258
MENEGATTI, Carlos Renato	223
MERCADO, Wilson Enrique Rosado	123
MERLO, Thaís Panhan.....	187
MESQUITA, Nathalya Cristina de Moraes Roso	181
MIAZAKI, Mauro	366
MIGUEZ, Maria Luiza	110
MILORI, Débora Marcondes Bastos Pereira.....	133, 299
MIRANDA, Paulo Barbeitas	54, 55, 282
MISOGUTI, Lino	125, 238, 247, 292
MONTRAZI, E. T.	130
MORAES, Tiago Bueno de	294
MORAES NETO, Gentil Dias de	233, 234
MOREIRA, Heline Hellen Teixeira	158
MORTARA, Renato A.	180
MORIYAMA, Lilian T.; MORIYAMA, Lilian Tan.	135, 280
MORIYA, Paulo Hisao	113
MOSQUEIRO, Thiago Schiavo; MOSQUEIRO, Thiago S	88, 89, 256, 257
MOUSSA, Miled Hassan Youssef.....	90, 113, 121, 122, 123, 233, 234
MULINARI, Evandro José.....	83
MÜLLER, S. T.	46, 47
MUNIZ, Heloisa dos Santos	159, 160
MUNIZ, João Renato Carvalho	296
MUNIZ, Sérgio Ricardo	93
MUNTE, Claudia Elisabeth.....	60, 63
NAVARRO, Marcos Vicente de Albuquerque Salles; NAVARRO, Marcos V. A. S	67, 69, 147, 186
NAPOLITANO, Reginaldo de Jesus	106, 107, 224, 226
NASCIMENTO, Alessandro Silva	193
NOBRE, Thatyane Morimoto.....	314
NONATO, Maria Cristina	328, 329
OLIVA, Glaucius.....	306, 338
OLIVA, Maria Amélia.....	325
OLIVEIRA, Anderson Roberto de	124
OLIVEIRA, Caio Martins Ramos de	87

OLIVEIRA, Everton Lucas de	289
OLIVEIRA, Luma Melo de.....	42
OLIVEIRA, P. S. L.	305
OLIVEIRA FILHO, R. L.	44
OLIVEIRA JUNIOR, Marcos de Oliveira	283, 284
OLIVEIRA JÚNIOR, Osvaldo Novais de; OLIVEIRA JUNIOR, O. N.	216, 314
OLIVEIRA-SILVA, R.; OLIVEIRA-SILVA, Rodrigo de	130, 289, 291
ORCIA, Débora	156
ORLANDI, André Orlandi de	125
OSORIO, Sérgio A. P.	111
PAINO, Ieda	191, 192
PAIVA, Rafael Rothganger de	99, 100, 229, 251
PAULA, Karina de	167
PAULI, Ivani	309
PEDROZO, Edwin Eduardo.....	229
PEÑAFIEL, Edwin Eduardo Pedrozo	99, 100, 251
PENHA, F. C.	97
PENTEADO, Poliana H.	94, 248, 250
PELISSARI, Pedro Ivo Batistel Galiote Brossi	136
PELLEGRINI, V. O. A....	333
PEPINO, Rebeka de Oliveira	82
PEREIRA, H. M.	73
PEREIRA, Humberto D'Muniz.....	166
PEREIRA, Rodrigo Gonçalves.....	101, 102
PEREIRA, Vera Jatenco.....	42
PEREIRA-DA-SILVA, Marcelo	197
PERES, Lucas Vieira Guerreiro Rodrigues.....	241
PERON, Thomas	217
PHILIPPSEN, Gisele Strieder	353
PIMENTA, Leandro Silva.....	38, 39
PINTO, Diogo de Oliveira Soares; PINTO, Diogo O. Soares	103, 116, 289
PINTO, Pedro Henrique Tomaz Torres.....	62
PINTO, Reynaldo Daniel	153, 164, 184, 353
PIOTROWSKI, Mauricio J.	50, 51
PIRES, Diego Paiva	95
PIRES, Layla	168
POLIKARPOV, Igor	62, 66, 81, 144, 146, 149, 172, 273, 274, 296, 305, 308, 310, 323, 326, 334
POLLI, Roberson Saraiva	289
PORTUGAL, R. V.	193, 194
PRADO, Raul Ribeiro	43
PRADO NETO, Elias Ximenes do	202
PRATA, Guilherme.....	236
PUHL, Ana Cristina	310
QUEIROZ, Diogo Rodrigues	129
QUEIROZ, Guylherme Emmanuel Tagliaferro de.....	208
QUEIROZ, Thiago B. de.....	254, 255, 285, 286
RAMIA, Marina Paglione	178
REBOREDO, Eduardo Horjales.....	70, 141, 158, 180
REGASINI, Luis Octavio.....	336
REICHERT, Detlef	242, 243
REIS, Caio Vinicius dos	149
REZENDE, Camila Alves	326
RIGO, Gustavo Vrech	354



RIBEIRO, E. M	44
RIMOLI, Caio Vaz	54, 55
RIVERA, Victor A. G.	111
RIVERA-ASCONA, Christian	270, 291
RODRIGUES, Francisco Aparecido	217
RODRIGUES, Luciene Cavalcanti.....	360
RODRIGUES, Nathalia de Campos	338
RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca	120
RODRÍGUEZ-MÉNDEZ, M. L.	58
ROETHLISBERGER, Beat	97
ROLIM, Thalita	189, 190
RONDINA, Gustavo G.	50, 51, 205, 206
SAALWAECHTER, Kay	242, 243
SABINO, Luis Gustavo	321
SCANNAVINO JUNIOR, Francisco de Assis.....	352
SAJA, J. A.	58
SANCHES, Edgar Aparecido	52
SALAS, Andres Rodriguez	126
SALAS, Oriana Inés Avila	183
SALVIO, Ana Gabriela	155
SANTAMARIA, Julian Andres Jaimes.....	240
SANTOS, Fabricio A.	151, 152
SANTOS, Jaciara Cássia de Carvalho	105
SANTOS, Jademilson Celestino dos	310
SANTOS, Jessica dos	164
SANTOS, Ricardo Nascimento dos.....	330
SARGO, Cíntia Regina.....	61
SCHNEIDER, José Fabian	283, 284
SEMAN, Jorge Amín.....	232
SERPA, Viviane	334
SERRÃO, V. H. B.	73, 193, 194, 320
SERROR, Pascale.....	187
SERRONE, Willian Matioli	36, 37
SHIOZAKI, Rodrigo Figueiredo	114, 115, 252, 253
SIQUEIRA, Jonathas de Paula	124, 238, 247
SIQUEIRA JÚNIOR, José Roberto	134
SIPAHI, Guilherme Matos	215, 218
SILVA, Albérico Borges Ferreira da Silva.....	228
SILVA, Ana Paula da	143
SILVA, Cecilia Carolina Pinheiro da	300
SILVA, Cíntia Maira Pereira da	200
SILVA, Everton Edesio Dinis	69
SILVA, Filipi Nascimento.....	350
SILVA, Flávio Henrique; SILVA, F. H	63, 333
SILVA, Geisiane Rosa da	52
SILVA, Juarez L. F. da.....	205, 206
SILVA, Isabela Almeida	103
SILVA, Ivan Rosa e; SILVA, I. R	76, 78, 162, 163, 193, 194, 316, 318
SILVA, L. V.	84
SILVA, Luis Fernando da	136
SILVA, Marco Túlio Alves da; SILVA, M. T. A	76, 78, 324
SILVA, Marília Faustino da	177
SILVA, Otávio de Brito	111
SILVA, Renato Aparecido Pimentel da.....	369

SILVA, Rodrigo de Oliveria	270
SILVA, Sumária Sousa	186
SILVA JUNIOR, Luiz Gonzaga da.....	212
SILVA JUNIOR, Vilson Vieira da.....	219
SILVA NETO, Antônio Marinho da	145
SILVEIRA, Hudson Pimenta	101, 102
SILVÉRIO, Carolina Menezes	153
SMAIRA, A. F.	46, 47
SLAETS, Jan Frans Willem	184, 357, 367
SOARES, Hendrik.....	209
SOARES, Pedro Manoel Sardinha Bico	116
SOBREIRA, Fernando Wellysson de Alencar	231
SOUZA, A. A.	130
SOUZA, Juliana Roberta Torini de	166
SOUZA, Luiz Vitor de	370
SOUZA, M. C.	73
SOUZA, M. M.; SOUZA, Marcos Michel	75, 320, 324
SOUZA, Mariana Laureano de	174
SOUZA, Milton Ferreira de	265, 267
SOUZA FILHO, Luiz Vitor de	43, 45
SOUZA, Marcos Antonio Moura de.....	134
SOUZA, Washington da Silva.....	295
STRINGASCI, Mirian D.	135
TABAK, Marcel.....	303, 304
TANNUS, Alberto.....	129, 200
TARGON, Cristiane Godoy	228
TAVARES, Pedro Ernesto Schiavinatti	114, 115
TEIXEIRA, Francesco Brugnera	70, 141
TELLES, Gustavo	252, 253
TELLES, Gustavo Deczka	114, 115, 204
TELES, João.....	289, 291
TELES, R. P.	374
TENORIO, Juan Carlos	165
THIEMANN, O. H.....71, 72, 73, 75, 76, 78, 80, 157, 162, 163, 193, 194, 302, 312, 315, 316, 318, 320, 324, 325	
TOMAZINI JUNIOR, Atílio	146
TORRES, Naiara Utimura.....	67
TOZONI, José Roberto	270, 291
TRAVIESO, G.	207, 210
TRIBUZI, Vinicius.....	258
TRIVELLA, D. B. B.	305
TSANG, Adrian.....	334
TSUTAE, Fernando Massayuki	275
USAJ, Gonzalo.....	244
VALENCIA, Camilo Akimushkin	88, 89
VANZELLA, Daniel Augusto Turolla; VANZELLA, D. A.T.....	38, 39, 91, 92, 260, 261
VEIGA, Rodrigo Soares	118
VERCIK, Andres.....	134
VIANA, Matheus Palhares	369
VIDOTO, Edson L. G; VIDOTO, E. L. G.; VIDOTO, Edson Luiz Gea; VIDOTO, Edson Luiz Géa.....	
..... 130, 213, 222, 270, 271, 289, 291. 339	
VIEIRA, Débora Fernanda.....	339
VIEIRA, Lucimar Sasso.....	361
VIEIRA, Nilton Cristi Silva	140, 287



I Semana do IFSC, 17 a 21 de outubro 2011, São Carlos-SP.

VILLAS BOAS, Paulino Ribeiro	133
VILELA, Gustavo Henrique Frigieri	129
VIVANCO, Franklin Adán Julca	99, 100, 251
VIVAS, Marcelo Gonçalves	247
VOGEL, Dominik	126
VOLLET FILHO, José Dirceu	155, 280
VOLTATODIO, Maria Luiza.....	172
ZADOYAN, Ruben	258
ZANATTA, Antonio Ricardo.....	278, 279
ZANGIROLAMI, Teresa Cristina	61
ZAWADZID, Krissia	41
ZENATTI, Letícia	81
ZERAIK, Ana Eliza.....	297, 298
ZILIO, Sérgio Carlos	124, 125, 131
ZUCOLLOTTO, Valtencir; ZUCOLOTTO, V.	56, 57, 58, 151, 152, 189, 190, 191, 192, 195, 196, 281, 287
WANDERLEY, Adilson Barros.....	40
WEBB, P.	305
WETTERICH, Caio Bruno.....	86
WIGGERS, Helton José	69
YUKALOV, Vyacheslav.....	252, 253

I Semana do Instituto de Física de São Carlos Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo
Av. Trabalhador São-carlense, 400 – São Carlos-SP – Brasil
CEP 13560-970
Caixa Postal 369

www.ifsc.usp.br/sifsc

Impresso e encadernado na Seção de Gráfica IFSC-USP.