

DIVULGA

SIFSC!

1ª edição

A Importância da Divulgação Científica

Julia Jaccoud &
Julia Marcolan

Divulgação Científica na SIFSC

Rui Sintra

Entrevista com a Profa. Yvonne P. Mascarenhas

Adonai Hilário da Silva
& Letícia Martinelli

Destaques Acadêmicos no IFSC



"Que os professores sejam queridos e admirados e os alunos considerados filhos intelectuais. Que a segunda geração seja melhor que a primeira."

Profa. Yvonne P. Mascarenhas



DIVULGA

SIFSC!

**Revista de Divulgação Científica da Semana
Integrada do Instituto de Física de São Carlos**

Publicação Eletrônica

Número 1 · 32 páginas · 06 de Julho de 2023

Equipe Editorial:

Elisa Iahn Goettems
Gabriel dos Santos A. Pinto
Adonai Hilário da Silva
Letícia Martinelli

Revisão:

Elisa Iahn Goettems
Gabriel dos Santos A. Pinto

Diagramação:

Paulina Rossi Ferreira
Julia Marcolan

Artes:

Paulina Rossi Ferreira
Laura Flores Dias

Apoio e patrocínio:



IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos



THORLABS

Editorial

“Os limites da linguagem são os limites do próprio mundo” (Ludwig Wittgenstein) e, portanto, um cientista com uma pesquisa que pouco dialoga com a sociedade vive em um mundo tão pequeno quanto o puxadinho na torre de marfim acadêmica que divide apenas com os poucos capazes de entender seu trabalho.

É por isso, caros leitores, que esta primeira edição da Divulga SIFSC! vem apenas como um primeiro passo em busca de conectar a curiosidade inata da comunidade aos projetos apresentados pelos alunos na Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos.

São aqui elencados os trabalhos inscritos no Desafio de Divulgação Científica do IFSC e alguns dos projetos de pesquisa que são referência do que fazemos como graduandos e pós-graduandos do Instituto.

Julho de 2023

Boa leitura!



Elisa Ianh Goettems
Diretora de Redação



Gabriel dos Santos A. Pinto
Revisor de Conteúdo

Missão da SIFSC

É uma verdadeira tradição no IFSC/USP a realização anual da Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos (SIFSC). Começamos em 2011, quando ainda faltava um grande evento no IFSC com suporte para os alunos chamarem de seu. Estendemos então a SEMAFIS dos graduandos, integrando-a com o Workshop Anual da Pós-Graduação, incrementando a semana com atrações tanto acadêmicas quanto culturais de segunda à sexta-feira e fundando a 1ª edição do Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas, que celebra os principais trabalhos apresentados pelos alunos na Semana Integrada e que recebe o nome em homenagem à grande pioneira da fundação de nosso Instituto além de grande referência da pesquisa em cristalografia no Brasil.

Ao longo dos últimos anos, nosso foco tem sido a integração e o intercâmbio científico entre os cursos, o cultivo de boas relações para os alunos na Comunidade IFSC e, principalmente, a potencialização da visibilidade dos trabalhos de pesquisa e extensão de nossos colegas. Acreditamos que a SIFSC tem o poder de inspirar o orgulho de ser cientista em cada estudante a tal ponto de fazer esse sentimento irradiar para todo o nosso entorno.

Atualmente a Semana Integrada é, em linhas breves, um evento de alunos para alunos, mas que tem cada vez mais atrações interessantes para o amplo público, como a sessão de pôsteres que abre o primeiro dia da semana e o Desafio de Divulgação Científica que pode ser assistido pelo [nosso canal no YouTube](#).



Juntamente conosco, alunos integrantes da Comissão Organizadora, a realização da SIFSC só é possível graças ao apoio de pesquisadores voluntários, dos colegiados, do [SBI](#) e demais funcionários do IFSC, além dos externos como a fabricante [THORLABS](#) de equipamentos ópticos para laboratório e dos nossos jurados que colaboram no Desafio de Divulgação.

A edição de 2022 juntaram-se atrações de grupos e extracurriculares como o [Filosoffísica](#), [CAIFSC](#), [CEFISC](#), [SINTEC](#), [Ciência Nossa](#), [Minas do IFSC](#), [Escritório AIMT](#), [Embrapii](#) e o [CEPOF](#).

A data e programação da nossa próxima SIFSC pode ser acompanhada através de nosso [website](#).

A Importância da Divulgação Científica

Julia Jaccoud & Julia Marcolan

A origem da ciência é tão antiga quanto a difusão do conhecimento em si, as batalhas de conhecimento em praças públicas na renascença são exemplo disso. A ciência e a difusão do conhecimento estão intrinsecamente ligadas, sendo inadequado dissociar essas duas práticas.

A Universidade, por sua vez, é fundamentada em três pilares: pesquisa, ensino e extensão. E a divulgação científica faz parte do âmbito da extensão possibilitando que o conhecimento produzido nas universidades retorne para a sociedade, informando, popularizando, tornando-o acessível e educando. Por outro lado, a pesquisa Confiança na ciência do Brasil em tempos de pandemia aponta que a confiança nos cientistas brasileiros é ligeiramente menor que na ciência (63,7%). Embora a maioria confie, é preocupante que um terço dos brasileiros não confie nos cientistas nacionais. Portanto, é imprescindível investir e valorizar a divulgação científica como uma ferramenta para fortalecer a confiança na ciência e promover a diversidade no campo científico.

É importante ressaltar que a ciência é um produto social, portanto se beneficia da diversidade, como explica o artigo Science benefits from diversity publicado na Nature (2018). Sendo assim, a discussão sobre como criar um ambiente científico não se limita mais aos benefícios da diversidade, mas sim a como promover e incentivar essa diversidade no meio científico. A divulgação científica desempenha um papel fundamental na construção de uma sociedade informada e engajada, além de promover a diversidade com os avanços científicos.

Nesta Edição

- Divulgação Científica

Matéria escura: como procurar algo que não conseguimos ver?

Quem manda copiar o DNA?

Microscopia Holográfica sem lentes

Inteligência Artificial no combate contra fungos resistentes

A história da Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

Você já ouviu falar em fungo negro?

A cooperação na evolução pré-biótica

Condensados de Bose-Einstein em armadilhas esféricas CePOF

Transporte de átomos utilizando a técnica OCZ

Partículas cósmicas ultraenergéticas (e exóticas!): os mensageiros do cosmos

-
- Entrevista com Yvonne P. Mascarenhas
 - Destaques Acadêmicos do IFSC

Laureados PYPM - Iniciação Científica

Laureados PYPM - Mestrado

Laureados PYPM -Doutorado

Menções Honrosas

- Mensagem Final

Divulgação científica na SIFSC

Rui Jorge Sintra

Marcada para o período entre 21 e 25 de agosto do corrente ano, a agora denominada “Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos” (SIFSC-13) é, acima de tudo, uma grande vitrina da ciência que se faz em um dos mais conceituados e produtivos institutos de pesquisa da Universidade de São Paulo, exibindo neste evento o grande conjunto dos trabalhos nas áreas de pesquisa e extensão realizados pelos alunos, com a participação de pós-doutores, professores, pesquisadores e funcionários.

Embora de alguma forma condicionada ainda pela pandemia, pode-se afirmar que a edição de 2022 da SIFSC nada ficou a dever às anteriores, pelo que a organização da edição de 2023 já se encontra a pleno vapor, sendo que uma de suas primeiras iniciativas é a elaboração da revista “Divulga SIFSC!”, uma publicação que será elaborada em versão virtual – com a possibilidade de após o evento também ter divulgação impressa –, e cujo foco será divulgar os trabalhos que foram realizados no ano passado, numa espécie de retrospectiva, como explica sua editora, a aluna de Doutorado em Física Teórica do IFSC/USP, Elisa Iahn Goettens (28). “Esta publicação – que terá inicialmente o formato online – deverá estar concluída e pronta para ser distribuída gratuitamente através de email e antes do término das inscrições da “SIFSC-13”, ou seja, no início do mês de julho. Além de se apresentar como um repositório do que aconteceu na edição de 2022, a publicação tem a finalidade de explicar qual é a missão da SIFSC e porque ela existe, já que isso será uma ponte para que todos entendam o que realmente se faz aqui no Instituto de Física de São Carlos. Com cerca de 30 páginas a cores, esta publicação irá dar destaque aos trabalhos acadêmicos que foram destaques na última edição da SIFSC, bem como a história do “Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas de Excelência Acadêmica (nesta edição chamada de Destaque Acadêmico) e de Divulgação Científica”, escrita pela cientista que dá o nome a este prêmio – a Profª Yvonne Primerano Mascarenhas. No âmbito deste prêmio iremos certamente dar destaque aos dez concorrentes que participaram do prêmio de divulgação científica, com o claro intuito de incentivar o maior número possível de alunos a participarem dele nesta edição de 2023”, sublinha Elisa.

Prêmio de Divulgação Científica SIFSC - 2022

A aluna de Doutorado em Física, Júlia Gouvêa Mamprim (23), foi a grande vencedora do “Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas de Divulgação Científica” (SIFSC-12). Para ela, a divulgação científica é uma ação que se revela bastante importante, principalmente quando o destino dessa divulgação é a sociedade. “Ao participar deste trabalho, consegui enxergar o quanto é importante esta questão de divulgar a ciência para o público fora da universidade, e que envolve alguma complexidade quando temos que utilizar discursos mais simples para que sejam facilmente entendidos por quem não domina a ciência. Sempre fui apaixonada por divulgação científica e já no ensino médio eu era uma fiel espectadora de vídeos sobre ciência”, revela Júlia.

No que diz respeito ao “Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas de Divulgação Científica”, que Júlia conquistou na SIFSC-12, com um vídeo de três minutos subordinado ao tema “Matéria escura: como procurar algo que não conseguimos ver?”, a jovem pesquisadora sublinha que procurou fazer um trabalho diferente do que é habitual, já que optou por uma animação comentada, onde todos os desenhos foram feitos por ela. “Me inspirei em trabalhos anteriores publicados no exterior e construí meu próprio roteiro que deu suporte às imagens que eu construí, originando uma animação bem simples. Demorei cerca de dez dias, já que tive de aprender a fazer animação sem muitos recursos técnicos. Aí, adaptei tudo, treinei como colocar minha voz no vídeo, enfim, foi um desafio e tanto, mas confesso que foi muito gostoso”, complementa a jovem pesquisadora, sorrindo.



Júlia Mamprim

Júlia Mamprim afirma que pretende participar novamente na disputa do “Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas de Divulgação Científica” e, com isso, talvez inaugurar um canal de divulgação científica no Youtube, já que foram muitos os elogios recebidos desse seu primeiro trabalho. “Este prêmio é muito legal, uma iniciativa muito bacana e, confesso, é muito divertido”, finaliza a pesquisadora.



Matéria escura: como procurar algo que não conseguimos ver?



Júlia Mamprim

Doutoranda - Grupo de Astrofísica de Partículas

O vídeo fala da matéria escura, que compõe 85% da massa do universo e, diferente da matéria comum, não interage com a luz. Sua existência é comprovada por meio de evidências astrofísicas, principalmente efeitos gravitacionais. Para compreender sua natureza, podem-se realizar diferentes experimentos, como o método de detecção indireta com raios gama.



Quem manda copiar o DNA?



Beatriz Lauriano de Oliveira

IC - Produção de Nanopartículas

Conheça as Quinases Dependentes de Ciclina (CDKs), as controladoras-chave do ciclo celular. Através de um vídeo informativo, mergulhe na compreensão de como essas enzimas regulam cuidadosamente a divisão celular e como as disfunções nas CDKs podem levar ao desenvolvimento de câncer. Desvende os segredos desse processo vital e sua relevância ao combate ao câncer.



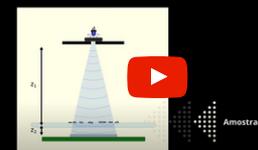
Microscopia Holográfica sem lentes



Camila de Paula D'Almeida

Doutoranda - Grupo de Óptica

Se alguém te pedir para imaginar um microscópio, muito provavelmente você deve imaginar um equipamento com cerca de três palmos de altura sobre uma bancada, que é capaz de ampliar imagens usando lentes. Neste vídeo é mostrado o desenvolvimento de um microscópio holográfico sem lentes.



Inteligência Artificial no combate contra fungos resistentes



João Paulo Cassucci dos Santos
Iniciação Científica

Em biologia de sistemas, é difícil prever quando uma rede de genes caracteriza uma função biológica ou é simplesmente um artifício do método utilizado para construí-las. O vídeo apresenta o uso da inteligência artificial para buscar redes que ajudem no combate à crescente resistência de fungos a fungicidas.



A história da Ressonância Magnética Nuclear (RMN)



Julia Marcolan
Doutoranda - Grupo de Ressonância Magnética

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) revolucionou a ciência desde o modelo atômico de Bohr-Sommerfeld até avanços modernos. Descobertas de Pauli, Rabi, Purcell e Bloch pavimentaram o caminho. Lauterbur, Mansfield e Damadian contribuíram para imagens por RMN. Hoje, a RMN é uma ferramenta clínica indispensável com aplicações em várias áreas.



Você já ouviu falar em fungo negro?



Maria Júlia Marques
Mestranda- Física Biomolecular

Durante a pandemia de COVID-19, várias infecções secundárias surgiram em pacientes, entre elas a mucormicose, uma doença fúngica agressiva com alta mortalidade, o *Rhizopus spp.* é o principal patógeno associado a mucormicose. Além disso, destacou-se a necessidade de investir em pesquisa e desenvolvimento de métodos de diagnóstico e controle.



A cooperação na evolução pré-biótica



Matheus Stefanini Marian
Iniciação Científica

Qual é a origem da vida? O que foi necessário para a formação da primeira célula? Como as moléculas se organizaram para formar sistemas mais complexos? As moléculas são capazes de formar grupos e cooperar entre si? Neste vídeo, exploramos as respostas para essas e muitas outras perguntas fundamentais.



Condensados de Bose-Einstein em armadilhas esféricas CePOF



Melissa Yelisetty
Iniciação Científica

O que um condensado de Bose-Einstein? Como uma armadilha pode manipular sua geometria resultando em características específicas? É sobre isso que falarei nesse vídeo.



Transporte de átomos utilizando a técnica OCZ



Vinicius Jose Martinez
Mestrando

Desenvolvimento um sistema de transporte óptico que move o ponto focal de um laser em experimentos com átomos frios. Com apenas 7 cm de movimento das lentes, foi possível deslocar o ponto focal em até 1.5cm, simplificando o transporte e reduzindo a necessidade de espaço físico.

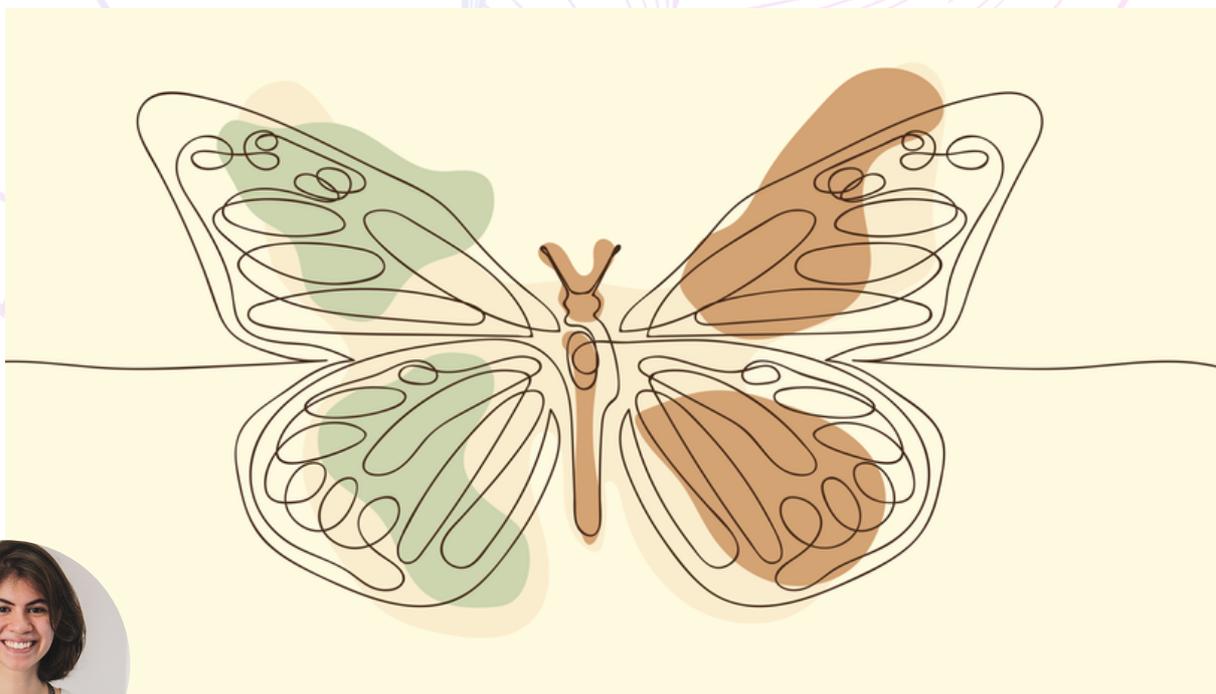


Partículas cósmicas ultraenergéticas (e exóticas!): os mensageiros do cosmos



Tales Ferraz de Paula
Doutorando

Imagine trabalhar com os mensageiros do cosmos, as chamadas astropartículas? Venha saber um pouco mais sobre essa área da astrofísica neste vídeo.



Luciana Andrade Dourado
Ganhadora concurso artístico - SIFSC12

Jurados Divulgação Científica



Aline Marcelle Ghilardi

Professora no departamento de Geologia da UFRN e divulgadora científica pela rede 'Colecionadores de Ossos'.

 @alinemghilardi

Beatriz Marinho Hormanseder

Bióloga e Paleontóloga. Atua desde 2013 como divulgadora científica principalmente em projetos de extensão e feiras científicas. Desde 2020 migrou para as redes sociais onde atua principalmente no twitter.

 @boringsuchus



Claudio Machado

Projeto de divulgação científica sobre preservação das serpentes e prevenção dos acidentes ofídicos voltados à população.

 [Papo de Cobra](#)

Eduardo Akio Sato

Produção de conteúdo audiovisual de divulgação científica em vídeos curtos sobre física (TikTok), lives com pesquisadores em formato de entrevista sobre carreira científica e também sobre ciências presentes nos filmes e séries, organização de eventos de divulgação científica.

 @institutoprincipia



Julia Jaccoud

Palestrante TEDx, professora e apresentadora no canal 'A Matemânica'.

 @amatemaniaca

Gabrielle Weber

Professora e divulgadora em 'Mamutes na Ciência'

 @mamutesnaciencia



Roberta Duarte

Doutoranda em Astrofísica e roteirista no 'Ciência todo dia'.

 @import_rob

Entrevista com Yvonne P. Mascarenhas

Adonai Hilário da Silva & Letícia Martinelli

Desde a primeira edição da Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos, em 2011, o evento promove a entrega do Prêmio Yvonne Primerano Mascarenhas (PYPM) de Excelência Acadêmica (nesta edição chamado de Destaque Acadêmico). Este prêmio foi criado em homenagem à Professora Dra. Yvonne Primerano Mascarenhas. Cientista brasileira de renome internacional na área de cristalografia e difração com raios-X. O forte interesse da professora Yvonne pela ciência apareceu enquanto ela ainda cursava o ensino médio. Tal interesse a levou ao curso de bacharelado em química. Durante o início de sua jornada como pesquisadora ela decidiu também estudar física, e recebeu o título de bacharela em ambas as áreas: química e física. Durante este tempo ela se interessou pela área de cristalografia e desde então, foi uma das pioneiras no desenvolvimento de pesquisas nesta área no Brasil. Para Yvonne Mascarenhas, a história da Física é cheia de grandes descobertas que de fato mudaram a vida da humanidade. Na sua visão quanto a existência do prêmio: "Estimular que os jovens do nosso país se interessem por ciência e tecnologia é uma coisa fundamental. Porque senão ficamos como um país do lado de fora do desenvolvimento".

Yvonne já participou, durante toda sua vida, de eventos importantes no exterior, congressos, estágios, e segundo ela, sempre há prêmios e é muito estimulante. No nosso país, esse estímulo não é tão bem proposto à sociedade, ou seja, buscar o crescimento intelectual, independente da área, e procurar ser um expert naquilo, ainda é pouco cultivado. "Buscar bons resultados desde o ensino básico deveria existir no Brasil, senão nunca teremos campeões olímpicos, grandes cientistas recebendo o Prêmio Nobel. O fato de existir o prêmio deve ser um estímulo e precisa ser valorizado no ambiente em que se encontra tanto para a geração presente quanto para as futuras."

Tendo essa visão, o objetivo central do prêmio é o estímulo à ciência, além de promover a valorização do trabalho de jovens cientistas brasileiros. O prêmio é dividido em três modalidades: iniciação científica, mestrado e doutorado, com um aluno sendo premiado em cada categoria.

Os vídeos dos finalistas das três modalidades do prêmio podem ser acessados através do link [youtube-IC e mestrado/youtube-Doutorado](#) ou dos Qr Codes abaixo.



Iniciação científica e
Mestrado



Doutorado

Para Yvonne, a existência do PYPM é uma forma de fazer nosso país avançar tanto na área de ciência como tecnológica. Ao mesmo tempo, ela se sente honrada pelo prêmio receber seu nome e feliz por existir o desejo, por parte dos alunos, de premiar a excelência dos próprios alunos. Ao seu ver, destacar não só quer dizer que a pessoa é inteligente, mas que também se aplicou bastante. "A ciência acontece por muito trabalho."

Como forma de amplificar a divulgação da ciência e tecnologia, em 2021 foi criado um segundo prêmio, complementar ao PYPM: o Prêmio de divulgação científica. Segundo a Professora Yvonne a divulgação "é um trabalho muito difícil, mas que deve ser feito. Principalmente no Brasil, onde a maioria da população não completa ensino fundamental, como despertar nelas o interesse pela ciência?". Mesmo talvez tendo pouco alcance nesse momento em que vivemos, não se pode parar de fazer a divulgação científica. Esta é uma área que possui tanto valor quanto o destaque acadêmico, fazendo com que haja um avanço nas descobertas científicas e tecnológicas do nosso país. Aqui na cidade de São Carlos temos o [Museu Mário Tolentino](#), o [Observatório Dietrich Schiel](#), [Centro de Divulgação Científica e Cultural \(CDCC\)](#), dentre outros programas de divulgação atuantes que são inspiradores e disponíveis para a sociedade de uma maneira simples e divertida.

A existência do prêmio promove um ambiente de competitividade fundamental para a valorização da ciência e o prestígio do trabalho científico. Segundo a própria professora Yvonne, "a competitividade é a busca da excelência, e nenhum país que não busque a excelência vai para frente". Em síntese, o PYPM é uma forma de prestigiarmos o trabalho de cientistas brasileiros e valorizar a propagação do conhecimento científico para fora da universidade.



Destaques Acadêmicos do IFSC

Gabriel dos Santos A. Pinto

Assim como o Prêmio Yvonne é uma forma de motivar os alunos ao empenho na comunicação e execução de seus projetos de pesquisa, sentimos ser nossa responsabilidade, como organizadores de todo o processo de avaliação, aproveitar os destaques que surgem no processo para exibir à comunidade interna e externa o tipo e qualidade da ciência que realizamos aqui no IFSC.

Os trabalhos de destaque foram escolhidos de acordo com a avaliação de professores, técnicos, pós-doutorandos e doutorandos do IFSC, além de pesquisadores convidados. Consideramos que esses estão entre os principais representantes do trabalho de pesquisa realizado por alunos no Instituto que dá sentido ao investimento que recebemos para continuar fazendo ciência de qualidade.

Laureados PYPM - Iniciação Científica

Introdução à teoria dos espinores e twistores

Juan Vitor O. Pêgas



Possui Bacharelado em Física com ênfase em Teórico-Experimental pelo Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo. Atualmente é aluno de Mestrado no Instituto de Física Teórica em São Paulo com orientação do Dr. Daniel A. T. Vanzella e coorientação do Dr. C. H. Grossi. Tem experiência em Relatividade e Gravação, atuando principalmente nos seguintes temas: relatividade, twistores e espinores.

RESUMO

Com o objetivo de propor uma ferramenta matemática que poderia ser utilizada em uma futura teoria quântica da gravidade, Roger Penrose desenvolveu a teoria dos twistores. Neste estudo, elaboramos a teoria dos espinores e como eles dão origem aos twistores. Estudamos sua realização física por meio de abordagens analíticas e numéricas. Apresentamos uma função de deformação que nos leva à métrica de Minkowski. Por fim, introduzimos o modelo que relaciona deformações do espaço dos twistores com o colapso da função de onda.

MOTIVAÇÃO

O maior entendimento da natureza está associado a dois grandes formalismos da física moderna: Relatividade Geral (RG) e Teoria Quântica de Campos (TQC). Apesar de seus inúmeros sucessos na descrição dos mais variados fenômenos ao longo das últimas décadas, é bem estabelecido que o "quadro geral" está incompleto, faltando uma teoria que descreva de forma unificada esses dois paradigmas.

Embora várias tentativas de unificação tenham sido estabelecidas, como a teoria das cordas e a teoria da gravitação em loop, ainda estamos longe da tão sonhada teoria quântica da gravidade.

Tendo em vista esse desafio, o físico-matemático Roger Penrose elabora em 1967 a teoria dos twistores, estabelecendo uma relação não-local entre o espaço-tempo de Minkowski e um espaço complexo projetivo tridimensional (espaço dos twistores) [1].

O intuito do físico era desenvolver o formalismo matemático sobre o qual a gravitação quântica seria elaborada. Esta teoria altera a forma de se pensar em RG, uma vez que, agora, o espaço-tempo não é mais visto como fundamental, mas como emergindo do espaço dos twistores.

Neste trabalho, estudamos o formalismo espinorial e como ele dá lugar aos twistores e sua relação com o espaço-tempo de Minkowski. Por fim, estudamos alguns progressos da teoria, com ênfase na relação entre seu limite não relativístico e o papel da gravidade no colapso da função de onda.

FORMALISMO

Os twistores são estabelecidos a partir dos espinores (blocos fundamentais de toda TQC). Os espinores surgem de modo natural da estrutura causal do espaço-tempo e, por isso, possuem um homomorfismo natural com os quadri-vetores do espaço-tempo. Uma vez estabelecida a noção básica de espinores, passamos para o estudo dos twistores. É possível mostrar que a forma mais geral de descrever um raio de luz L no espaço-tempo de Minkowski é utilizando o esquema apresentado abaixo

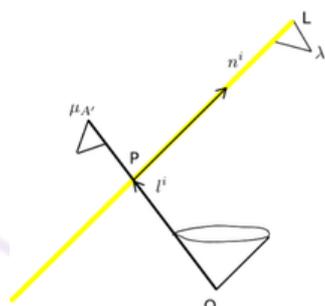


Figura 1: Descrição completa do raio de luz L utilizando espinores.

onde os espinores $\mu_{A'}$ e λ^A estão sujeitos ao vínculo $\mu_{A'} = -i\lambda^A I_{AA'}$ que é denominado relação de incidência.

Dessa forma, definimos um twistor L^a como $L^a = (\lambda^A, \mu_{A'})$ no qual λ^A e $\mu_{A'}$, satisfazem a relação de incidência.

De modo intuitivo, os twistores são pontos em um espaço complexo que representam raios de luz do espaço-tempo. De modo matemático, os twistores são elementos de um fibrado vetorial sobre a esfera de Riemann $p\mathcal{T} \rightarrow \mathbb{CP}^1$ com relação entre pontos vizinhos $(\lambda^A, \mu_{A'})$ e $(\tilde{\lambda}^A, \tilde{\mu}_{A'})$ dada por

$$\begin{aligned}\tilde{\lambda}^A &= \lambda^A + t f^A(\lambda^B, \mu_{B'}), \\ \tilde{\mu}_{A'} &= \mu_{A'},\end{aligned}$$

no qual t é um parâmetro de deformação e a função de transição do fibrado. Explicitando a função de transição e utilizando a relação de incidência é possível obter a métrica conforme do espaço-tempo. Mais do que isso, existe uma relação um-para-um entre essas deformações do espaço dos twistores e o espaço-tempo curvo da Relatividade Geral: o espaço-tempo emerge do espaço dos twistores.

RESULTADOS

A teoria dos twistores é um vasto formalismo matemático, que pode muitas vezes ofuscar a intuição física por trás da teoria. Dessa forma, neste trabalho, nos preocupamos em traduzir em termos físicos o arcabouço matemático utilizado na elaboração dos twistores. Em primeiro lugar, recuperamos analiticamente a equação no espaço tridimensional que descreve um twistor (congruência de Robinson) e mostramos geometricamente todas as propriedades dos twistores, incorporada na famosa figura mostrada abaixo



Figura 2: Congruência de Robinson.

No estudo de deformações do espaço dos twistores, introduzimos uma nova função de transição $f^A = (-\lambda\omega^1, 0)$ que recupera a métrica conforme do espaço-tempo de Minkowski, utilizando o seguinte sistema de coordenadas global no espaço dos twistores.

$$\begin{cases} Q = -\frac{\sqrt{2}}{\mu_{1'}} \tilde{\lambda}^0 = -2\lambda z - (x + iy) + \lambda^2(x - iy) \\ T = \frac{\sqrt{2}}{\mu_{1'}c} \tilde{\lambda}^1 = t - \frac{1}{c}z + \frac{\lambda}{c}(x - iy), \end{cases}$$

no qual recuperamos as coordenadas cartesianas utilizando a relação de incidência. Além disso, a consistência desse sistema de coordenadas se torna claro ao tomarmos o limite não-relativístico, obtendo uma noção global de tempo $T=t$, como esperado no espaço-tempo de Galileu.

Por fim, ilustramos o mecanismo de Penrose–Dunajski sobre o qual o espaço dos twistores sofreria uma deformação graças ao colapso da função de onda. De modo geral, Penrose argumenta que o colapso da função de onda é induzido pela gravidade [2], o que iria gerar uma deformação no espaço dos twistores. Dessa forma, assumindo que o colapso ocorra durante um intervalo T_0 e T_1 no instante T_0 deformamos a coordenada temporal dos twistores

$$\tilde{T} = T + \frac{1}{c}f(Q, T).$$

Podemos resumir o mecanismo por meio da figura abaixo, onde $\mathcal{O} \oplus \mathcal{O}(2)$ e $\mathcal{O}(1) \oplus \mathcal{O}(1)$ representam o espaço dos twistores não-relativísticos e relativísticos, respectivamente, em notação de fibrados.

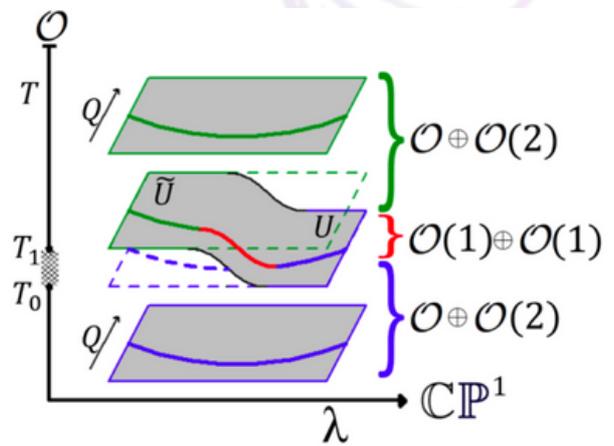


Figura 3: Deformação no espaço dos Twistores. Retirado de [3].

A curva azul, descrita pela coordenada Q , anterior ao instante T_0 na Figura 3 refere-se ao espaço dos twistores newtonianos. Durante o intervalo $[T_0, T_1]$, o espaço é deformado pela expressão anterior, nos levando à curva em vermelho. Por fim, no instante T_1 outro limite não-relativístico é tomado, nos levando novamente ao espaço dos twistores não-relativísticos, representados pela curva verde na figura. Portanto, existe uma forma de deformarmos o regime não-relativísticos no relativístico sem causar discontinuidades no espaço dos twistores, o que torna o mecanismo de Penrose–Dunajski uma nova forma de visualizar o colapso da função de onda.

REFERÊNCIAS

- [1] PENROSE, R. Journal of Mathematical Physics 8 (fev. de 1967).
- [2] PENROSE, R. Found. Phys. 44 (ed. Scardigli, F. & Nespola, M.) 557–575 (2014).
- [3] DUNAJSKI, M. & Penrose, R. Annals Phys. 451, 169243. arXiv:2203.08567 [gr-qc] (2023).

Laureados PYPM - Mestrado

Estudo teórico do fenômeno de cavitação acústica no tecido biológico para otimização da Terapia Sonodinâmica (SDT)

Camila Aparecida Antunes



Possui graduação em Física Bacharelado pela Universidade Estadual de Londrina (2019), especialização em Estatística com ênfase em Pesquisa Quantitativa (2021) pela mesma instituição e mestrado em Física pela Universidade de São Paulo (2023). Atualmente é aluna de doutorado em Física Teórica e Experimental no Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo (USP) atuando na área de Biofotônica, mais especificamente no estudo da interação da luz e do ultrassom com o tecido biológico para aplicação na terapia sono-fotodinâmica (SPDT), com orientação do Prof. Dr. Sebastião Pratavieira.

RESUMO

A Terapia Sonodinâmica (SDT) é um procedimento não invasivo que pode ser utilizado na remoção de células cancerígenas. Para isso, a SDT se utiliza da combinação de ultrassom (US), uma droga sensível ao US, chamada de sonossensibilizador (SS) e oxigênio molecular (O₂). Essa combinação resulta na produção de espécies reativas de oxigênio que interagem com as células e levam à morte celular. Uma vantagem da utilização de terapias com US consiste na fácil penetração do mesmo no tecido biológico devido a sua baixa atenuação, o que permite que a SDT atinja tumores profundos. Além disso, o US pode ser altamente focado em pequenas áreas permitindo maior controle do tratamento. [1] Um dos efeitos causados pela propagação do US no tecido é a nucleação, ou seja, a formação de bolhas de gás e vapor no meio. [2] Quando tais bolhas começam a crescer e oscilar, diz-se que elas estão cavitando. [3] A dinâmica de cavitação da bolha e sua possível implosão pode ser classificada como inercial ou não inercial e resulta em efeitos para o organismo, incluindo danos celulares e teciduais. Esses fatores tornam fundamental o entendimento dos fenômenos envolvidos na cavitação acústica visando potencializar suas aplicações. Apesar disso, os modelos teóricos utilizados para descrever a cavitação não são capazes de equacionar com precisão o comportamento deste fenômeno no tecido biológico.

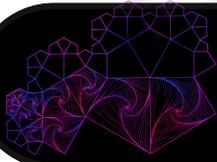
Assim, o objetivo deste trabalho consiste em compreender os mecanismos que descrevem a nucleação e a cavitação acústica no tecido biológico, partindo da análise dos fenômenos em meios aproximadamente homogêneos. O estudo das pressões mínimas necessárias para ocorrência de nucleação e cavitação em água e no tecido biológico, e a estimativa de possíveis ajustes nos parâmetros e equações teóricas utilizadas para descrever a cavitação também serão realizados, para que tais modelos possam prever mais precisamente a interação do US com o tecido, objetivando a elaboração de um protocolo eficiente e seguro para a aplicação da SDT no tratamento do câncer de pele.

Para isso, foi realizada a análise dos modelos teóricos da dinâmica de nucleação/cavitação descritos na literatura, além de simulações considerando-se parâmetros de meios aquosos e teciduais nos softwares Wolfram Mathematica e MATLAB, e testes computacionais com possíveis ajustes nos modelos analisados. A partir dos resultados obtidos com as simulações computacionais, verificou-se que a tensão superficial do meio é de grande importância para a ocorrência de nucleação e apenas a partir de ajustes em tal tensão é possível determinar com precisão os valores energéticos necessários para a formação de bolhas no tecido. Além disso, a presença de heterogeneidades no meio é capaz de reduzir significativamente a energia mínima necessária para a ocorrência de cavitação. Ademais, com pequenos acréscimos de energia, bolhas nucleadas podem implodir gerando aumentos significativos de temperatura nas proximidades e causar danos ao tecido. Desse modo, é necessário ajustar as equações teóricas para que seja possível o melhor entendimento dos parâmetros envolvidos nos processos de nucleação e cavitação de modo a se elaborar um protocolo seguro para aplicação do US no tratamento do câncer de pele.

REFERÊNCIAS

- [1] NENE, L. C. et al. Journal of Inorganic Biochemistry, v. 217, p. 111397-1-111397-12, Apr. 2021. DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2021.111397.
- [2] VLAISAVLJEVICH, E. et al. Ultrasound in Medicine & Biology, v. 41, n. 6, p. 1651-1667, 2015.
- [3] BRUJAN, E.-A. Heidelberg: Springer, 2011.

Laureados PYPM - Doutorado



Microscopia para além das lentes

Camila de Paula D'Almeida



Doutoranda no IFSC - USP com orientação do Prof. Dr. Sebastião Prata no Grupo de Óptica. Possui graduação em Física com habilitação em Óptica e Fotônica pela Universidade de São Paulo (2015), mestrado em Física pela Universidade de São Paulo (2018). Tem experiência na área de Física, com ênfase em áreas clássicas de fenomenologia e suas aplicações. Atuando principalmente nos seguintes temas: microscópio óptico, holografia, sem lentes, portátil, recuperação de fase.

Relevância da Pesquisa

Se alguém te pedir para imaginar um microscópio, muito provavelmente você deve imaginar um equipamento com cerca de três palmos de altura sobre uma bancada, que é capaz de ampliar imagens usando lentes. E de fato os microscópios costumam ter essas características. Esse tipo de equipamento óptico tem seu funcionamento baseado no uso de lentes desde sua origem, no século XIV. No entanto, o uso de câmeras digitais em sistemas ópticos possibilitaram o surgimento da microscopia sem lentes. Essa técnica abrange diferentes tipos de instrumentações e tem sido estudada pela comunidade científica na última década, inclusive com a junção de técnicas de interferência, para oferecer instrumentações mais compactas e de baixo custo, que permitem a quebra da relação entre o tamanho da imagem produzida e o tamanho de suas características mais reduzidas (parâmetro importante das imagens, conhecido como resolução). Neste trabalho, fizemos o desenvolvimento de microscópios sem lentes compactos e de fácil uso, que utilizam a holografia – uma técnica de gravação de interferência – para gravar informações de objetos em escala micrométrica. Esse método já conhecido na comunidade científica e utilizado para a construção desses equipamentos, soma às vantagens da microscopia sem lentes a possibilidade de gravar imagens de amostras pequenas e transparentes, como são as células. A contribuição oferecida por este trabalho foi a montagem e comparação de dois microscópios sem lentes por diferentes métodos, utilizando códigos abertos em linguagem computacional Python para fazer o controle dos dispositivos e a reconstrução das imagens.

Como ela é feita

Para a gravação das imagens, a amostra é posicionada sobre uma câmera digital da qual são removidas todas as lentes. Uma fonte de luz LED é usada com um filtro espacial (um pequeno furo com 50 micrômetros de diâmetro) para a iluminação, como apresentado na Figura 1. É importante que a amostra permita a transmissão parcial da iluminação incidente.

Dessa forma, o sensor abaixo dela grava o que chamamos de holograma, que é simplesmente uma imagem de interferência gerada pela soma da luz que passa pela amostra sem interagir com ela com a luz que de fato interage (por difração, por exemplo). Após a gravação, essa imagem é reconstruída por métodos computacionais de forma a oferecer informações completas referente a luz que atinge o sensor. Devido à proximidade da amostra com o sensor da câmera digital, a imagem gravada tem dimensões maiores que as que são usualmente obtidas pela microscopia tradicional (com lentes), como apresentado na Figura 2.

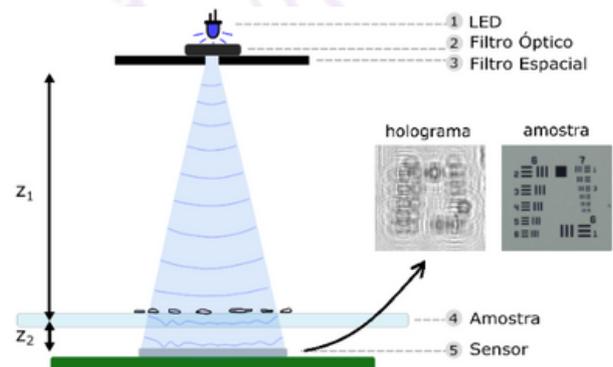


Figura 1: Desenho representativo de um microscópio holográfico sem lentes e seus componentes e a exemplificação de um holograma obtido a partir de uma amostra com estruturas de tamanho padronizado.

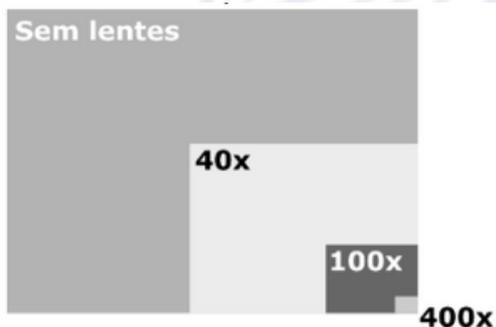


Figura 2: Tamanho da imagem de um microscópio sem lentes comparado com o tamanho da imagem de microscópios comuns com diferentes ampliações.

Para facilitar este processo de gravação, desenvolvemos códigos computacionais utilizando a linguagem Python para controlar os dispositivos que compõem nossos equipamentos. Outros códigos também foram desenvolvidos na mesma linguagem para reconstruir as informações de interferência contidas nos hologramas.

Para a obtenção de uma imagem reconstruída, como a que é mostrada na Figura 3, é necessário oferecer uma sequência de imagens semelhantes como entrada do processamento. No caso do método multialtura essa diferença é a distância entre a amostra e o sensor durante a gravação da imagem. Já no caso do método multispectral, essa diferença é dada pelo uso de diferentes cores da iluminação incidente.

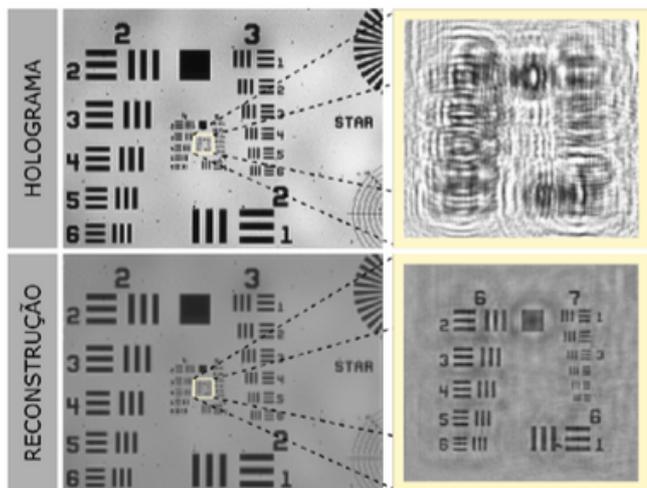


Figura 3: Exemplo de um holograma antes e após o processamento de reconstrução usado.

Resultados

Dois microscópios holográficos sem lentes foram desenvolvidos de forma a apresentarem um tamanho reduzido, como mostrado na Figura 4, e processos de gravação e reconstrução das imagens facilitados por meio de códigos computacionais escritos em Python. As dimensões reduzidas e a automação no controle permitem que esses equipamentos sejam usados para monitorar amostras ao longo do tempo em bancada ou mesmo dentro de ambientes controlados como estufas de cultivo celular.

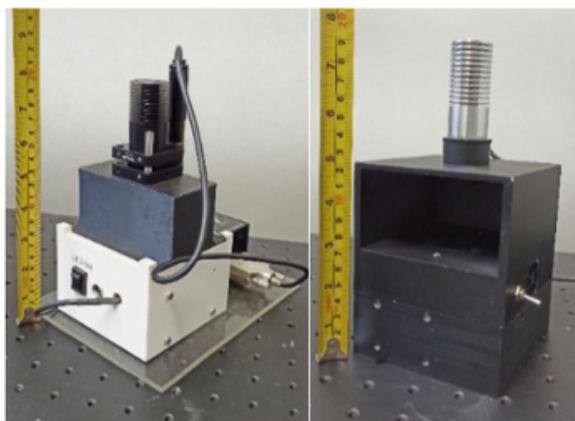


Figura 4: Foto do microscópio multialtura (à esquerda) e multispectral (à direita) desenvolvidos no IFSC.

Nossos microscópios foram submetidos a testes com amostras padronizadas, como a que está apresentada nas imagens da Figura 3. Estes testes nos permitiram observar que a resolução dos nossos microscópios é de aproximadamente $5\mu\text{m}$ e depende principalmente das características do sensor e da iluminação utilizados.

Além dos testes iniciais, nossos equipamentos também foram usados em outras aplicações como: observação de micro-organismos; detecção e contagem de leveduras e cistos de *Giardia*; e análise temporal de cicatrização de cultura celular.

REFERÊNCIAS

Este trabalho já está finalizado e mais informações e referências podem ser encontradas na tese derivada dele:

D'ALMEIDA, Camila de Paula. Development of lens-free holographic microscopes using multiheight and multispectral phase recovery methods. 2023. Tese (Doutorado em Física Teórica e Experimental) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023. doi:10.11606/T.76.2023.tde-29052023-143103. Acesso em: 2023-06-17.

Menções Honrosas

QCD em altas ordens no decaimento do Higgs em dois glúons

Guilherme Nogueira



Bacharel em Física pela Universidade Estadual Paulista, campus de Rio Claro (2022). Atualmente é aluno de mestrado no Instituto de Física de São Carlos (IFSC) - USP, com orientação do Prof. Dr. Diogo Boito. Atuando na área de Física de Partículas e Campos, com ênfase em Cromodinâmica Quântica.

A fim de explorar fenômenos além do Modelo Padrão, a física de precisão tem sido uma abordagem valiosa diante da falta de observações diretas de nova física no LHC (Large Hadron Collider). Foi nesse acelerador de partículas que o Higgs foi descoberto em 2012, uma importante conquista para a compreensão das leis fundamentais da natureza. O foco recai sobre o setor de Higgs, uma partícula crucial na geração de massa para outras partículas elementares. Medições precisas dos acoplamentos do Higgs com outras partículas do Modelo Padrão têm sido realizadas desde então, visando identificar possíveis desvios em relação ao Modelo Padrão. Esses desvios podem ser pequenos e, portanto, é essencial que as previsões teóricas sejam altamente precisas, evitando resultados inconclusivos. Por meio do cálculo das diferentes seções de choque do Higgs e das larguras de seus decaimentos, em ordens cada vez mais altas na teoria de perturbação, buscam-se previsões teóricas mais refinadas.

Modelo Padrão

O modelo padrão da física de partículas é uma teoria que nos oferece um mapa para entender a estrutura básica do universo em seu nível mais fundamental. Ele descreve as partículas elementares que compõem toda a matéria ao nosso redor, assim como as forças que as conectam. É como um conjunto de instruções que nos permite compreender como essas peças fundamentais se encaixam e interagem umas com as outras. No entanto, embora o Modelo Padrão seja uma ferramenta poderosa, ele ainda não explica todos os fenômenos observados na natureza, o que nos impulsiona a continuar pesquisando e buscando uma compreensão mais completa do universo.

Higgs decaindo em dois glúons

É importante destacar que o Higgs não interage diretamente com os glúons, partículas mediadoras da interação forte, de modo que o processo de decaimento logo na ordem dominante se dá através de um loop de quarks, figura 2.a), com uma contribuição majoritária do quark top. O cálculo da amplitude de decaimento, que pode ser obtido por meio do correlator de dois glúons, pode ser utilizado na seção de choque para a produção do bóson Higgs por fusão de dois glúons ($\gamma\gamma$), que é a principal fonte de produção do Higgs tanto no LHC atual quanto no futuro LHC de alta luminosidade.

Na abordagem da QCD perturbativa, a largura de decaimento é atualmente conhecida até a ordem [1] na teoria efetiva em que a massa do quark top é considerada infinita, sendo possível definir um acoplamento efetivo entre o bóson de Higgs e os glúons como mostrado na figura 2.b). Esses avanços teóricos e cálculos precisos são fundamentais para a compreensão das propriedades do Higgs e a busca por indícios de fenômenos além do Modelo Padrão.

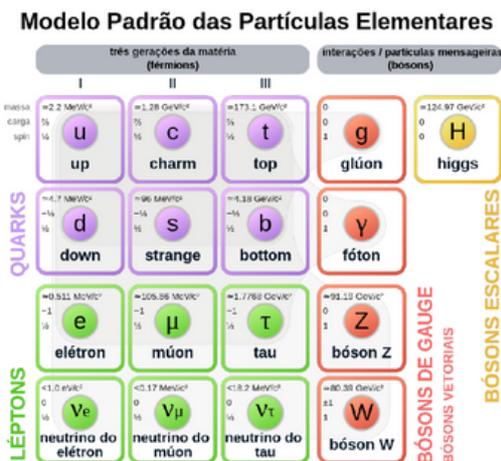


Figura 1: Representação esquemática das partículas fundamentais do Modelo Padrão. (Crédito: Wikimedia Commons).

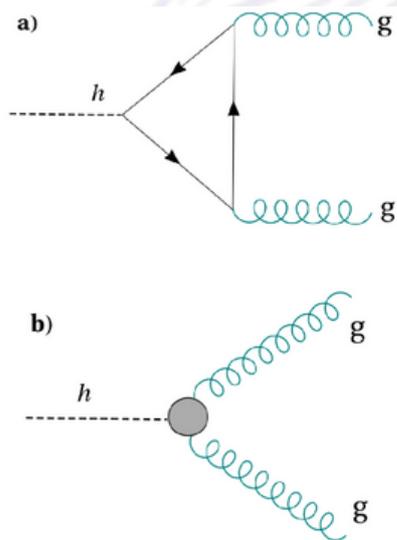


Figura 2: a) O diagrama de Feynman na ordem dominante para o decaimento b) Diagrama na teoria efetiva, onde a massa do quark top é considerada infinita.

Incerteza de truncamento

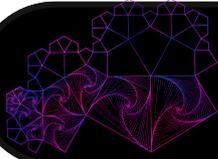
A visão de mundo proveniente da teoria de perturbação, em que, uma determinada interação entre partículas fundamentais pode ser construída pouco a pouco via acréscimo de potências no acoplamento (em QCD perturbativa pode ser considerado muito pequeno) constituindo aos poucos um universo interagente com base em um não interagente. Esses tipos de séries são divergentes e há uma conjectura de que sejam assintóticas, o que implica que, em ordens intermediárias na teoria de perturbação, o valor da série deve se aproximar do valor verdadeiro, o que não necessariamente é ruim, pois de acordo como a regra de Carrier:

“Séries divergentes convergem mais rápido que séries convergentes porque elas não precisam convergir.”

O principal problema é que tais séries apresentam complicações intrínsecas devido à dificuldade no cálculo de potências mais elevadas, resultando em um erro teórico de truncamento nos observáveis. Com o objetivo de reduzir o erro de truncamento no decaimento do Higgs em dois glúons, utilizamos diversos métodos para estimar os coeficientes de ordens mais altas. Entre os métodos utilizados, destacam-se os aproximantes de Padé, que são aproximantes racionais amplamente implementados na literatura para a previsão de coeficientes [2]. Tal método foi empregado no espaço de Borel (Padé-Borel), para o correlator de dois glúons [3] no limite large-, um limite da QCD que funciona como um laboratório para testar nossos métodos antes de aplicá-los para QCD completa, pois nesse limite conhecemos exatamente os coeficientes em todas as ordens em teoria de perturbação. Após efetuar nossas análises neste laboratório, verifica-se o sucesso nas estimativas realizadas quando comparadas com os coeficientes exatos do limite large-, sugerindo boas perspectivas para continuação do trabalho na QCD completa.

REFERÊNCIAS

- [1] HERZOG, F., et al. Journal of High Energy Physics 2017.8 (2017): 1-26.
- [2] BOITO, Diogo, Cristiane, Y. London, and Pere Masjuan. Journal of High Energy Physics 2022.1 (2022): 1-23.
- [3] JAMIN, Matthias. Journal of High Energy Physics 2012.4 (2012): 1-14.



A cooperação na evolução pré-biótica

Mateus Stefanini Mariano



Cursando bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares pelo Instituto de Física de São Carlos (IFSC - USP) com orientação do Dr. José Fernando Fontanari.

Como estudar a origem da vida?

A vida é um fenômeno que vem fascinando muitas gerações de pensadores desde o surgimento da filosofia e da ciência. Apesar desse enorme interesse que persiste ao longo da história do pensamento humano, ainda não sabemos como a vida se originou. Porém, não estamos completamente perdidos nessa empreitada. Temos algumas pistas sobre quais são os melhores caminhos a se tomar para compreendermos a origem da vida.



Figura 1: Escala temporal da evolução da vida na Terra.

Pode-se dizer que se existe um segredo da vida, a chave desse segredo está na auto-organização da matéria. Nesse contexto, o cenário ideal para estudar o surgimento da vida é a evolução pré-biótica.

O que é evolução pré-biótica?

Como o próprio nome sugere, a evolução pré-biótica consiste no processo de evolução molecular que precedeu o surgimento da vida. Uma das principais teorias que explicam a evolução pré-biótica é conhecida como modelo de quase-espécies.

Uma quase-espécie é um conjunto de sequências semelhantes, as quais podem ser de qualquer entidade sujeita ao processo evolucionário e portadora de informação, submetidas a um processo contínuo de mutação e seleção natural. No caso desta pesquisa, as sequências estudadas são de RNA, uma vez que o RNA era a principal molécula portadora de informação biológica no contexto pré-biótico.

O que foi feito na pesquisa?

Primeiro, por meio do modelo de quase-espécies, foi desenvolvido um modelo matemático que descreve a evolução de uma população de moléculas de RNA em um contexto pré-biótico. Segundo, a partir desse modelo, foram desenvolvidos programas que resolvem as equações do modelo. Por fim, através da análise dessas soluções, foram obtidos diversos resultados.

Quais resultados foram obtidos?

As quase-espécies habitam um espaço de sequências, o qual pode ser visualizado como um espaço geométrico cujos pontos são as sequências possíveis que podem ser formadas a partir de uma dada quantidade de monômeros.

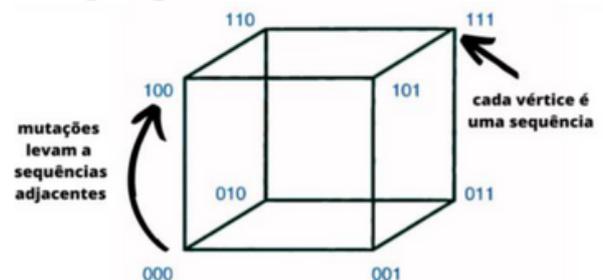


Figura 2: Espaço de sequências para um conjunto de sequências de 3 monômeros (3 dígitos) e 2 tipos de monômeros (0 ou 1).

Ao se replicarem, as sequências sofrem mutações. Essas mutações são responsáveis por fazer com que as quase-espécies se movam pelo espaço de sequências. Apesar de as mutações serem aleatórias, o caminho que as quase-espécies percorrem não o são. Elas são guiadas pelo relevo adaptativo, o qual relaciona cada sequência a um valor adaptativo, ou seja, a sua capacidade de se replicar e aumentar em frequência nas próximas gerações. Logo, sequências que possuem valores adaptativos maiores que o resto da população tendem a "puxar" a quase-espécie para si.



Figura 3: Esquema de um relevo adaptativo.

Dessa forma, uma quase-espécie tende a escalar um relevo adaptativo e a se estabilizar em torno de picos. Esse processo não depende somente da topologia do relevo, mas também da taxa de mutação. Quanto menor a taxa de mutação, mais centrada é a distribuição de seqüências em torno do pico, o que caracteriza o regime de quase-espécies. Quanto maior a taxa de mutação, mais dispersa é a distribuição de seqüências.

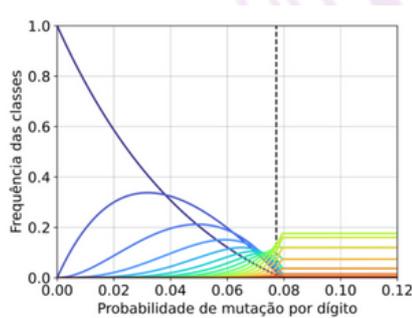


Figura 4: Regime de quase-espécies e regime estocástico separados pelo limiar de erro (tracejado) no caso do relevo adaptativo de pico íngreme. As seqüências são separadas em classes (diferentes cores) de acordo com as suas distâncias em relação à seqüência com maior valor adaptativo (a seqüência que está no pico do relevo adaptativo).

Para uma taxa de mutação crítica, essa dispersão é levada ao limite e a população sai do pico do relevo adaptativo e caminha aleatoriamente pelo espaço de seqüências, o que representa o regime estocástico. Conforme os valores adaptativos de outras seqüências em torno do pico aumentam, menos abrupta se torna a diferença de altura no relevo e a transição entre os dois tipos de regimes vai se tornando cada vez mais suave.

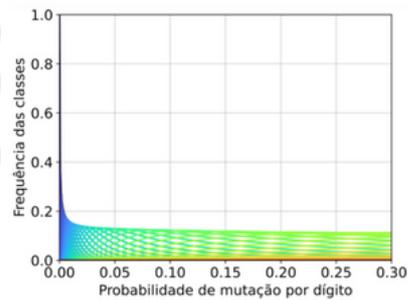


Figura 5: Desaparecimento da separação abrupta entre os regimes de quase-espécie e estocástico no relevo adaptativo de pico suave.

O que se pode concluir?

Devido a mutações, moléculas geram moléculas semelhantes durante as suas replicações. Esse processo de produção recíproca de moléculas semelhantes pode ser chamado de cooperação. Dessa forma, sempre quando há replicação, há mutação e cooperação, o que mostra que a cooperação é um elemento fundamental da vida.

REFERÊNCIAS

- [1] EIGEN, M. Die Naturwissenschaften, v. 58, n. 10, p. 465–523, 1971.
- [2] SWETINA, J; SCHUSTER, P. Biophysical Chemistry, v. 16, p. 329–345, 1982.
- [3] MICHOD, R. E. Integrative and Comparative Biology, v. 23, n. 1, p. 5–14, 1983.

Nanopartículas luminescentes dopadas com íons lantanídeos para aplicação em sensores químicos e biológicos

Letícia Cerqueira Vasconcelos



Mestranda em Ciência e Engenharia de Materiais na USP com orientação da Dra. Andréa Simone Stucchi de Camargo. Possui graduação em Ciências Físicas e Biomoleculares pela Universidade de São Paulo.

Relevância da pesquisa

As nanopartículas por conversão ascendente de energia (UCNPs), que são capazes de emitir luz com comprimento de onda menor do que o de excitação, têm sido utilizadas em um grande número de aplicações, mas é provavelmente no campo de sensoriamento que elas melhor evidenciam seu potencial. Além disso, ainda no âmbito dos sensores, as nanopartículas (NPs) dopadas com Nd^{3+} (NdNPs) podem ser usadas como sensores de temperatura. Visto isso, este trabalho teve como foco otimizar a síntese e caracterização das UCNPs a partir da modificação dos componentes da matriz e íons dopantes e estudar as Nd-NPs a partir da caracterização termométrica. Dessa maneira, os materiais obtidos serão aplicados em outros projetos do grupo para o desenvolvimento e construção de sensores de analitos biológicos e de temperatura.

Como ela é feita?

Todas as nanopartículas foram preparadas com base em métodos previamente reportados, como o método de coprecipitação em temperatura elevada proposto por Gnanasammandhan et al. 1 e por Wang et al. 2 Diversas sínteses foram realizadas com diferentes matrizes e íons dopantes. Inicialmente, foram sintetizadas UCNPs compostas por uma matriz inorgânica de NaYF_4 de fase hexagonal dopadas com os pares $20\%\text{Yb}^{3+}/2\%\text{Er}^{3+}$ e $25\%\text{Yb}^{3+}/0,3\%\text{Tm}^{3+}$.

Em seguida, realizou-se a síntese com a matriz de NaGdF_4 e os mesmos pares de íons dopantes. Essa substituição foi feita já que o Gd^{3+} é um íon menor, o que dificulta a difusão do flúor e produz NPs menores em comparação com de Y^{3+} . Por último, foram sintetizadas NPs com matrizes de NaYF_4 e NaGdF_4 , desta vez, dopadas apenas com $5\%\text{Nd}^{3+}$. Ao redor desse core de matriz, foi sintetizado um shell também de matriz para causar uma blindagem dos íons emissores próximos à superfície, diminuindo a probabilidade de perdas de energia de maneira não radiativa. Para caracterização, foram utilizadas técnicas de espectroscopia de fotoluminescência, difratometria de raios-X (DRX) e microscopia eletrônica de transmissão (MET).

Resultados já observados

Foi possível verificar a diminuição do diâmetro das UCNPs constituídas com matriz NaGdF_4 em aproximadamente 2 - 2,5x em comparação à UCNPs de NaYF_4 . As UCNPs com Y^{3+} tinham cerca de 20 nm de diâmetro e as com Gd^{3+} tem 8-11 nm como é possível observar nas figuras 1D) e 2D). Também se verificou a manutenção das propriedades de conversão ascendente de energia (UP) de maneira que os picos de emissão não foram deslocados e permaneceram com o mesmo comportamento com uma razão próxima entre os picos verificadas nas figuras 1A), 1B), 2A) e 2B). Além disso, a rede cristalina analisada a partir do DRX apresentaram o padrão esperado (figura 3). Os testes de termometria com as NPs dopadas com Nd^{3+} não foram finalizados, porém tivemos resultados promissores nas caracterizações estruturais e de fotoluminescência dessas amostras (figura 4).

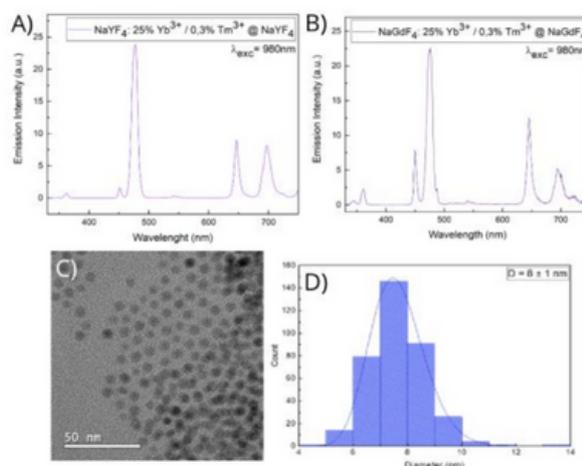


Figura 1: A) Espectro de emissão de $\text{NaYF}_4: 25\%\text{Yb}^{3+} / 0,3\%\text{Tm}^{3+}$. B) Espectro de emissão de $\text{NaGdF}_4: 25\%\text{Yb}^{3+} / 0,3\%\text{Tm}^{3+} @ \text{NaGdF}_4$. C) Imagem de MET da amostra de $\text{NaGdF}_4: 25\%\text{Yb}^{3+} / 0,3\%\text{Tm}^{3+} @ \text{NaGdF}_4$. D) Distribuição de diâmetro da amostra de $\text{NaGdF}_4: 25\%\text{Yb}^{3+} / 0,3\%\text{Tm}^{3+} @ \text{NaGdF}_4$.

Ao se replicarem, as sequências sofrem mutações. Essas mutações são responsáveis por fazer com que as quase-espécies se movam pelo espaço de sequências. Apesar de as mutações serem aleatórias, o caminho que as quase-espécies percorrem não o são. Elas são guiadas pelo relevo adaptativo, o qual relaciona cada sequência a um valor adaptativo, ou seja, a sua capacidade de se replicar e aumentar em frequência nas próximas gerações. Logo, sequências que possuem valores adaptativos maiores que o resto da população tendem a "puxar" a quase-espécie para si.

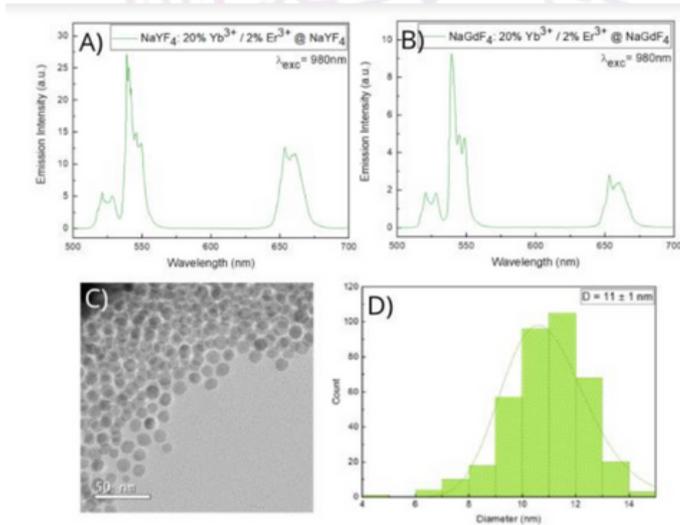


Figura 2: A) Espectro de emissão de NaYF₄: 20%Yb³⁺ / 2% Er³⁺ @NaYF₄. B) Espectro de emissão de NaGdF₄: 20%Yb³⁺ / 2% Er³⁺ @ NaGdF₄. C) Imagem de MET da amostra de NaGdF₄: 20%Yb³⁺ / 2% Er³⁺ @ NaGdF₄. D) Distribuição de diâmetro da amostra de NaGdF₄: 20%Yb³⁺ / 2% Er³⁺@ NaGdF₄.

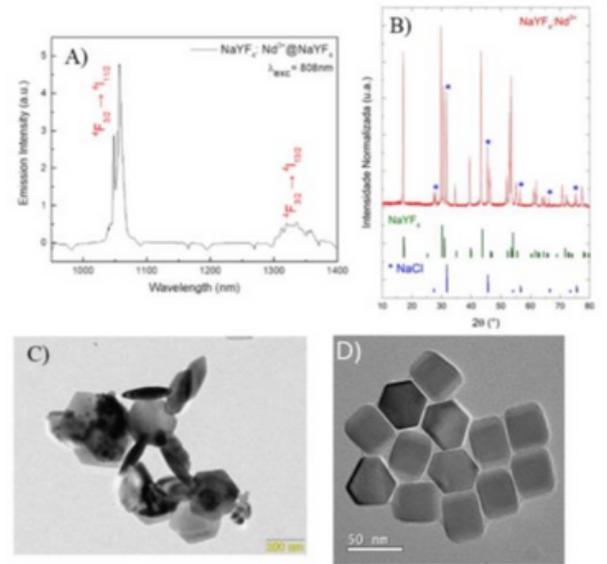


Figura 4: A) Espectro de emissão de NaYF₄: 5%Nd³⁺ @NaYF₄. B) DRX comparativo de NaYF₄: 5%Nd³⁺ @NaYF₄ com a matriz hexagonal e NaCl. C) e D) Imagens de MET de diferentes amostras de NaYF₄: 5%Nd³⁺ @NaYF₄.

Conclusões

Com base nos resultados apresentados, conclui-se que foi possível obter NPs otimizadas a partir da substituição do Y³⁺ pelo Gd³⁺ na matriz utilizada assegurada pela redução de aproximadamente 2 - 2,5x no diâmetro das amostras, além das outras propriedades que foram mantidas, como desejado. Os resultados indicam então, que as aplicações desejadas podem ser realizadas chamando atenção para novas pesquisas que possibilitem alcançar tais objetivos.

REFERÊNCIAS

- [1] GNANASAMMANDHAN, M. K., IDRIS, N. M., BANSAL, A., HUANG, K. & ZHANG, Y. Nat. Protoc. 11, 688–713 (2016).
- [2] WANG, F., DENG, R. & LIU, X. Nat. Protoc. 9, 1634–1644 (2014).

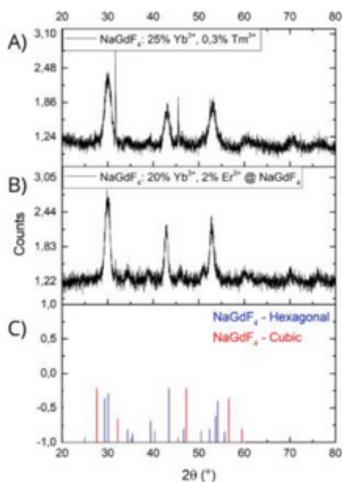


Figura 3: DRX comparativo entre amostras de A) NaGdF₄: 25%Yb³⁺/0,3% Tm³⁺ B) NaGdF₄:20%Yb³⁺/2% Er³⁺@NaGdF₄ C) padrão conhecido para as matrizes hexagonal e cúbica.

Predição de interações fármaco-alvo com Biclustering Random Forests

Pedro de Carvalho Braga



Bacharel em Ciências Físicas e Biomoleculares pelo Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo (IFSC-USP), desenvolveu projeto de iniciação científica que consistiu em análise bioinformática das cópias do transposon não-LTR Perere-3 no genoma de *Schistosoma mansoni*, com orientação do Dr. Otavio Henrique Thiemann e coorientação do Dr. Ricardo Cerri. Atualmente busca, com técnicas de bioinformática, caracterizar os íntrons mínimos de *S. mansoni* e investigar suas possíveis funcionalidades biológicas na regulação da expressão gênica, como projeto de mestrado em Física Biomolecular pelo IFSC-USP.

Visamos desenvolver métodos de aprendizado de máquina mais eficientes e transparentes para a predição de interações entre diferentes tipos de entidades, com especial destaque à interação entre fármacos e proteínas-alvo no organismo. A pesquisa é motivada pelo grande impacto de se acelerar o processo de descoberta e reposicionamento de fármacos, direcionando os custosos processos de análise laboratorial para os candidatos mais promissores.

Propomos uma nova adaptação de algoritmos baseados em árvores de decisão para a tarefa de predição de interações, reduzindo consideravelmente o tempo de treinamento e possibilitando o processamento de maiores conjuntos de dados.

Os resultados obtidos até o momento são promissores, com os modelos desenvolvidos alcançando resultados competitivos em comparação a algoritmos tradicionais desse campo de pesquisa. Espera-se que as ferramentas e metodologias desenvolvidas possam impulsionar o progresso das técnicas em diversas áreas correlatas.

O que nos motiva?

A busca por novos medicamentos e por novos efeitos terapêuticos de medicamentos já conhecidos é um campo de pesquisa em constante efervescência, dado o enorme impacto sanitário e econômico que as descobertas nessa área podem trazer. Central a esse processo de descoberta é o entendimento de como ocorrem as interações entre as moléculas farmacêuticas e seus diversos "alvos" que existem no nosso organismo, visto que a natureza dessas interações é determinante ao efeito terapêutico.

Frequentemente, os principais "alvos" de um fármaco são proteínas, moléculas muitas vezes enormes, de extrema variedade e complexidade, que compõem inúmeras estruturas no nosso corpo e participam de quase todas as reações químicas que nos mantêm vivos. Infelizmente, os mecanismos de funcionamento dos medicamentos herdam essa complexidade, pois a maneira com que uma interação fármaco-proteína acontece é altamente dependente das estruturas de cada um deles, levando em conta as posições e características químicas de cada uma de suas partes constituintes. E se descrever e caracterizar a estrutura de um fármaco com algumas dezenas de átomos já é frequentemente uma tarefa difícil, imagine a caracterização de uma estrutura proteica, com suas dezenas de milhares de átomos. Assim, é compreensível que os processos laboratoriais para analisar essas estruturas e entender fundamentalmente como uma molécula com efeito terapêutico influencia uma proteína sejam extremamente custosos e demorados.

Principalmente em casos específicos, em que já se tem algumas relações fármaco-proteína de interesse, a curadoria de especialistas, simulações computacionais detalhadas e ensaios químicos baseados nas estruturas interagentes são e sempre serão de suma importância. Contudo, o uso dessas técnicas se torna impraticável em cenários mais amplos de busca e descoberta de medicamentos, em que milhares de proteínas e moléculas candidatas a fármacos são testadas umas contra as outras à procura de novas interações.

Aí se encontra a importância de métodos computacionais que auxiliem nesse processo preliminar, direcionando as análises mais custosas às interações mais promissoras e reduzindo o custo e o tempo necessários para que novos tratamentos cheguem à população.

Mesmo sem saber com exatidão o formato tridimensional que uma proteína assume, há diversas informações que ainda podemos considerar ao buscarmos pelas interações mais prováveis.

Por exemplo, pode-se especular que proteínas com composição parecida, com sequências de componentes similares, tendam a ter estruturas tridimensionais parecidas, e portanto, interajam de forma similar com um mesmo fármaco. Ou ainda, se dois determinados fármacos interagem com um mesmo conjunto grande de proteínas, é provável que uma proteína que sabidamente interage com o primeiro fármaco também interaja com o segundo.

Buscar padrões como esses em grandes conjuntos de dados é um típico objetivo de técnicas de aprendizado de máquina, de forma que elas vêm sendo amplamente estudadas para tarefas de predição de interações como a nossa. Contudo, os modelos mais profícuos do campo, baseados em redes neurais profundas, não são capazes de explicar o raciocínio por trás de suas decisões, de forma que sua habilidade em resolver o problema de predição dificilmente se traduz em conhecimento de fato sobre a tarefa.

O objetivo do projeto é então estudar e desenvolver algoritmos de aprendizado de máquina mais transparentes e adaptados às nuances dos problemas de predição de interações, com especial atenção às interações fármaco-proteínas.

Qual a nossa abordagem?

Utilizamos conjuntos de dados de interação fármaco-proteína disponíveis publicamente, correspondentes a diferentes classes proteicas [5].

Entre todos os pares possíveis de proteínas, são previamente calculados índices de similaridade baseados apenas em sua composição, sem levar em conta sua estrutura tridimensional. De forma similar, uma métrica de similaridade entre cada par de fármacos é obtida a partir de segmentos em comum de sua estrutura química.

Os bancos de dados então listam um conjunto de pares fármaco-proteína cuja interação foi experimentalmente averiguada, e o objetivo é construir um programa computacional capaz de receber parte dessas interações conhecidas e extrair padrões baseados nas similaridades entre proteínas e entre fármacos que possam determinar as interações. Em seguida, para as interações conhecidas que não lhe haviam sido apresentadas, o programa deve prever corretamente quais pares interagem e quais devem não interagir, e assim avaliamos seu desempenho de aprendizado.

O método escolhido por nós para extrair esses padrões se baseia na construção de árvores de decisão. Pense que temos uma proteína e um fármaco em mãos, e a decisão que precisamos tomar é se eles interagem ou não. As informações que temos sobre cada um são porcentagens de similaridade com as outras proteínas do nosso conjunto e com os outros fármacos.

Por exemplo, sabemos que o nosso fármaco é 80% similar ao fármaco A, só 20% similar ao fármaco B, etc. As árvores de decisão organizam a informação que temos em um caminho com diversas bifurcações (semelhante a uma árvore), em que a cada bifurcação é colocada uma pergunta no formato "a similaridade do nosso fármaco com o fármaco A é maior que 60%?" ou "a similaridade da nossa proteína com a proteína X é maior que 45%?". Dependendo da resposta, seguimos por um lado ou outro da bifurcação, até que, em algum momento, o caminho nos leva a uma conclusão (se há ou não há interação, veja a Figura 1).

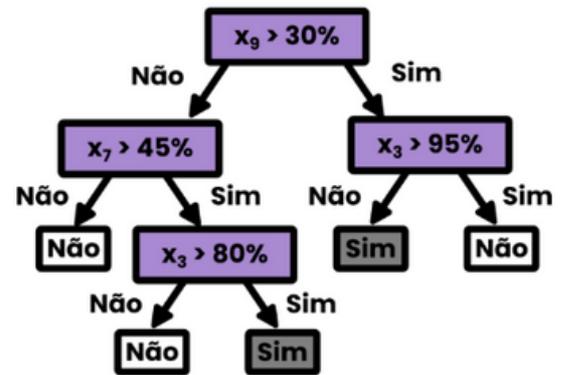


Figura 1: Exemplo de árvore de decisão. x , nesse caso representa um valor de similaridade com uma proteína ou com um fármaco do conjunto de dados. A cada bifurcação, a pergunta é se um valor de similaridade é maior que um determinado limiar. A resposta "sim" nos leva a tomar o caminho da direita, e a resposta "não" leva ao da esquerda. No final, chegamos a uma conclusão sobre a interação, representada pelas caixas brancas e cinzas.

A construção desses diagramas em forma de árvore não é trivial, e múltiplas abordagens existem. Mais comumente, começa-se procurando a pergunta mais informativa possível, que gere a melhor pontuação no nosso conjunto de dados mesmo com uma única bifurcação. A seguir, seguimos por cada um dos caminhos da primeira bifurcação e procuramos novamente a pergunta mais informativa possível em cada caso, agora considerando duas bifurcações. E assim por diante, até que as predições sejam boas o suficiente ou até que não haja mais perguntas informativas a serem feitas.

Da mesma forma que um grupo grande de pessoas com experiências de vida diferentes tende a tomar decisões melhores que um indivíduo isolado, frequentemente optamos por construir um conjunto de árvores de decisão, cada uma sendo construída com um subconjunto aleatório dos nossos dados. Esses comitês de árvores aleatorizadas são chamados de random forests, e a decisão final é normalmente tomada com base na opinião da maioria [2].

Como as perguntas em cada bifurcação são claramente acessíveis, árvores de decisão são modelos notadamente transparentes, existindo diversas formas de se extrair informações sobre os dados utilizados em sua construção [1].

O principal custo computacional e ponto de maior divergência entre as metodologias de construção de árvores de decisão é a busca pelas melhores perguntas em cada etapa. Partindo de métodos de treinamento criados especificamente para problemas de predição de interações [3][4], propusemos uma adaptação para essa busca que torna o treinamento consideravelmente mais rápido ($O(n^3)$ contra $O(n^3 \log n)$), sem perda significativa na qualidade de predição. Tal ganho possibilita a construção de random forests em dados mais volumosos, sem precisar de árvores mais simples ou descartar parte do conjunto de dados.

Também observamos que a maioria dos estudos da área se concentra em buscar interações novas entre fármacos e proteínas já com outras interações conhecidas. No nosso estudo, reimplementamos algoritmos anteriores e os comparamos com foco nos cenários em que o fármaco, a proteína ou ambos não possuem interações cadastradas no conjunto de dados.

Por fim, estamos desenvolvendo um conjunto de ferramentas computacionais acessíveis ao público, que facilite a construção de modelos de aprendizado de máquina adaptados a problemas de predição de interações, englobando diversos algoritmos da literatura sob alguns poucos procedimentos mais gerais.

O que já conseguimos concluir?

Mostramos que utilizar todo o conjunto de dados tem impacto positivo na qualidade da predição de árvores de decisão em comparação à estratégia de se descartar a maior parte das interações desconhecidas. Dado que o descarte parece ser a estratégia mais frequentemente observada na literatura, sugere-se que a busca por alternativas capazes de explorar os dados em sua totalidade requer mais atenção.

De forma geral, os modelos baseados em conjuntos de árvores de decisão se puseram entre os mais bem colocados em todos os testes realizados, ultrapassando de forma estatisticamente significativa alguns algoritmos tradicionais da área.

A adaptação no treinamento das árvores desenvolvida por nós se mostrou mais eficiente que o algoritmo original, em concordância com as previsões teóricas. Mesmo assim, não foi observada perda significativa na qualidade de predição em nenhum dos casos estudados, apontando a nova versão das árvores como uma interessante candidata a estudos futuros, que as apliquem em outros contextos diversos de interações.

REFERÊNCIAS

- [1] BREIMAN, L. Classification and regression trees. Routledge, 1984.
- [2] BREIMAN, L. Machine learning 45 (2001), pp. 5–32.
- [3] PLIAKOS, Konstantinos; GEURTS, Pierre; VENS, Celine. Machine Learning 107 (2018), pp. 1257–1281.
- [4] PLIAKOS, Konstantinos; VENS, Celine. BMC bioinformatics 21 (2020), pp. 1–11.
- [5] YAMANISHI, Yoshihiro et al. Bioinformatics 24.13 (2008), pp. i232– i240.

Unveiling the origin of UHECR: the role of local sources

Luciana Andrade Dourado



Graduada no Bacharelado em Astronomia pelo Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas da Universidade de São Paulo (IAG - USP). Foi membro e Diretoria Administrativa da Empresa Júnior dos Alunos do Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas (IAG Júnior) e monitora bolsista no Observatório Abrahão de Moraes (OAM). Atualmente, é monitora voluntária no OAM, representante discente da Comissão Coordenadora do Curso do Bacharelado em Astronomia (CoC AGA) e orientanda do Prof. Reinaldo Santos de Lima na área de Astrofísica de Altas Energias.

Resumo

Cosmic rays are charged relativistic particles of extraterrestrial origin. In particular, particles belonging to the highest energy end ($E > 10^{18}$ eV) of the energy spectrum of cosmic rays are commonly named ultra-high energy cosmic rays (UHECR). There are several open questions involving these fascinating particles. For instance, a mystery that remains in Astrophysics is the origin of UHECR. Due to interactions with the radiation and magnetic fields that permeate the Universe, the detection of these particles does not provide direct information about their original energy spectrum, distribution of arrival directions and abundance. UHECR energy losses via photopion production and photodisintegration cause a suppression in the energy spectrum, which highlight the relevant role that local sources play to describe the spectrum. [1] Furthermore, the flux of cosmic rays drops orders of magnitude with increasing energy, which results in a low statistic for the range in which UHECR belong to.

While the aforementioned features make the study of UHECR quite challenging, it is possible to notice that there is plenty of space for important discoveries to come out. In the last years, the Pierre Auger Observatory, the largest cosmic ray detector ever built, has measured the first indications of anisotropy in the distribution of arrival directions of such particles, which has raised the expectation of solving this decades-long question in the upcoming years.

[2] Therefore, the aim of this work is to further develop the understanding about the impact of astrophysical hypotheses in modeling the main anisotropy measurements used to search for the origin of UHECR. The goal is to calculate an upper limit on the density of sources without making too strong hypotheses by analyzing the dipole amplitude provided by the Pierre Auger Observatory. [3] It is worth mentioning that having such information about the sources is extremely important, since it can help us to eliminate a huge space of possibilities of existing models in highly energetic cosmic ray research.

REFERÊNCIAS

- [1] LANG, R. G. et al. Physical Review D, v. 102, n. 6, p. 063012, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevD.102.063012.
- [2] THE PIERRE AUGER COLLABORATION. Science, v. 357, n. 6337, p. 1266-1270, 2017. DOI: 10.1126/science.aan4338.
- [3] LANG, R. G. et al. Physical Review D, v. 103, n. 6, p. 063005, 2021. DOI: 10.1103/PhysRevD.103.063005.

Núcleos Ativos de Galáxias e Galáxias Starbursts como fonte dos sinais de anisotropia dos UHECR

Cainã Oliveira



Doutorando do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo (IFSC-USP), no grupo de Astropartículas APOEMA com orientação do Dr. Luiz Vitor de Souza Filho. Também realizou mestrado e bacharelado em física na mesma instituição. Tem estudado núcleos ativos de galáxias como fontes locais de raios cósmicos ultra energéticos, com foco em astrofísica multi-mensageira (neutrinos e fótons secundários) e propagação extragaláctica.

Relevância da Pesquisa

Desde o início do século XX, os cientistas já sabiam que partículas altamente energéticas vindas do espaço atingiam a atmosfera da Terra. Estas partículas ficaram conhecidas como raios cósmicos e o seu estudo possibilitou a descoberta de diversas partículas até então não conhecidas, como o pósitron, o múon e o pión - algumas delas são hoje exploradas em tecnologias, como nas tomografias por emissão de pósitron (PET) usadas na medicina; e em tomografias de múons usadas em medidas geológicas.

É consenso atual que os raios cósmicos são acelerados em ambientes astrofísicos extremos. Parte deles são acelerados em nossa própria Galáxia, como em remanescentes de supernovas. Entretanto, a origem da fração mais energética, conhecida como raios cósmicos ultra energéticos (UHECR, sigla em inglês) ainda é um mistério [1]. Sabemos que estas partículas são núcleos de átomos com velocidade muito próxima da velocidade da luz. Para se ter noção, a energia dessas partículas é tão grande quanto a energia de uma bola de tênis lançada em uma partida profissional. Graças aos esforços realizados pela Colaboração do Observatório Pierre Auger, hoje sabemos que os UHECR são de origem extragaláctica [2]. Este resultado provém da medida da direção do dipolo dos UHECR: o fluxo de UHECR não é idêntico em todas as direções do céu, mas apresenta uma pequena variação na forma de uma modulação dipolar.

A principal hipótese para origem dos UHECR é que sejam acelerados em Núcleos Ativos de Galáxias (AGNs) ou em Galáxias Starburst (SBGs). Os AGNs são alimentados pela emissão de jatos de buracos negros localizados no centro dessas galáxias. Já as SBGs são galáxias com intensa atividade de formação estelar.

Neste trabalho comparamos resultados de simulações computacionais da propagação de UHECR no ambiente extragaláctica com as medidas que obtemos aqui na Terra. Dessa forma, podemos diferenciar os cenários de origem para os UHECR e comparar os sinais que deveriam ser gerados por AGNs e SBGs.

Metodologia

Durante a propagação, os UHECR sofrem diversos processos físicos. Um deles é a interação com a radiação de fundo presente no Universo, causando perda de energia e fragmentação dos UHECR constituídos por núcleos compostos. As perdas de energia são maiores quanto maior a distância que os UHECR devem percorrer. Assim, fontes muito distantes não contribuem significativamente com UHECR de energias muito elevadas (>50 EeV).

Para estudar a propagação dos UHECR no ambiente extragaláctica usamos o programa CRPropa3. Para realizar as simulações é necessário incluir, dentre outros parâmetros:

→ modelos para o campo magnético que existe entre as diferentes galáxias (campo magnético extragaláctica, EGMF). É difícil obter dados para o EGMF, então utilizamos três modelos computacionais (chamados AstroR, Prim2R e Prim [3]) de modo a estudar a propagação em campos com diferentes intensidades e estruturas;

→ modelo para o campo magnético galáctica. Nossa galáxia também possui um campo magnético que deflete os UHECR. Nesse trabalho, utilizamos o modelo JF12 [4].

→ as fontes que estão emitindo as partículas. Existem diversos objetos astrofísicos no Universo que devem estar emitindo UHECR. Nesse trabalho nós queremos estudar os sinais de UHECR gerados em AGNs e SBGs próximos, distando até aproximadamente 20 Mpc da Terra. Escolhemos estudar os sinais de três AGNs e dezenove SBGs nessa região.

→ Como não conhecemos a composição de UHECR que as fontes emitem, nós iremos estudar emissões de prótons, núcleos de He, N, Si e Fe.

Após selecionar as fontes, precisamos utilizar algum critério para estimar a luminosidade de UHECR para cada fonte. Temos que fazer isso porque não sabemos qual a contribuição de cada uma das (possíveis) fontes para o fluxo de UHECR. Nesse trabalho, selecionamos três formas de estimar o fluxo de UHECR, considerando que a luminosidade de UHECR para cada fonte é (a) idêntica; ou que é proporcional à luminosidade de (b) rádio ou (c) raios gamma detectada para cada uma delas.

Por fim, depois de obtermos os dados das simulações de propagação, calculamos a direção do dipolo em cada um dos cenários: os três campos magnéticos, os cinco núcleos e as três luminosidades.

Resultados

Variando a classe fontes de UHECR (AGNs, SBGs ou ambas), nós determinamos a direção do dipolo em cada cenário. Como a direção do dipolo varia de acordo com a faixa de energia que está sendo considerada, calculamos os resultados para eventos em duas faixas energéticas: acima de 8 EeV e acima de 32 EeV. A figura 1 mostra direção desses dipolos no cenário em que apenas os AGNs contribuem para o fluxo de UHECR, o campo magnético extragaláctico é o Prim, e a luminosidade é proporcional à luminosidade de raios gama.

Conclusão

Fazendo uma análise comparativa de todos os cenários (faixas de energia, campo magnético extragaláctico, composição e luminosidade) é possível concluir que os AGNs foram capazes de reproduzir a direção do dipolo para energias acima de 32 EeV no caso em que a composição é constituída por Si e Fe. Como não conseguimos reproduzir a direção dos dipolos com SBGs de maneira consistente, isso indica que os AGNs devem ser a principal fontes de UHECR acima de 32 EeV.

Não foi possível reproduzir a direção do dipolo para a faixa de energia acima de 8 EeV. Nesse caso, fontes mais distantes ou efeitos da nossa Galáxia precisam ser estudados.

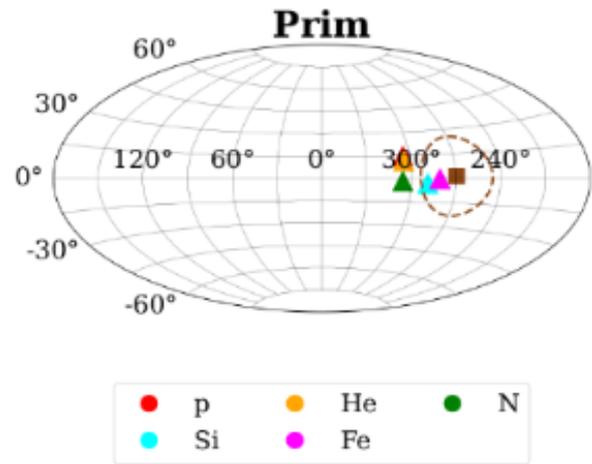


Figura 1: Direção do dipolo para o cenário AGN, campo magnético Prim e luminosidade proporcional a raios gama. As diferentes cores são diferentes composições. Os resultados são para eventos com energia acima de 32 EeV. O quadrado marrom mostra a direção da medida do Observatório Pierre Auger, e a linha pontilhada a incerteza da medida.

REFERÊNCIAS

- [1] ALVES BATISTA, Rafael et al. *Frontiers in astronomy and space sciences*, v. 6, p. 23, 2019.
- [2] PIERRE AUGER COLLABORATION et al. *Proceedings of Science*, v. 395, p. 335, 2022.
- [3] HACKSTEIN, Stefan et al. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, v. 475, n. 2, p. 2519-2529, 2018.
- [4] JANSSON, Ronnie; FARRAR, Glennys R. *The Astrophysical Journal*, v. 757, n. 1, p. 14, 2012.

Caracterização de minerais brasileiros por múltiplas técnicas cristalográficas e espectroscópicas

Gerson Anderson de Carvalho Lopes



Doutorando no Grupo de cristalografia no IFSC - USP, tem como orientador o Dr. Marcelo Barbosa de Andrade e coorientador o Dr. Daniel Atencio. Atua profissionalmente como Analista em Física e responsável técnico pelo Laboratório de Física (LABFIS) da Universidade do Estado do Amapá (UEAP) e foi Professor substituto no colegiado de física da Universidade Federal do Amapá (UNIFAP) entre 2019 e 2021. Possui graduação em licenciatura em química pela UEAP e licenciatura em Física pela UNIFAP, Especialização em Metodologia do Ensino de Física e Química (UCAM-ProMinas) e Mestrado em Física pelo Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo (IFSC-USP). Atua em pesquisa na área de ciência dos materiais com ênfase nas técnicas de Cristalografia por difração de raios X de pó e monocristal, espectroscopia RAMAN e Microsonda eletrônica (EPMA), e possui experiência em Microscopia de Força Atômica (AFM). Além destes possui interesse nas áreas de Ensino, História e Filosofia da Ciência.

Relevância da Pesquisa

A caracterização de minerais brasileiros é fundamental para o desenvolvimento científico, tecnológico e, sobretudo, econômico do país. A partir do conhecimento aprofundado das espécies minerais brasileiras pode-se ampliar, diversificar e tornar mais eficiente a exploração, beneficiamento e uso destes recursos. Contudo, apesar de o Brasil ser um dos países com maior representatividade na produção mineração mundial, o conhecimento científico acerca das espécies minerais brasileiras ainda é incipiente. Apenas 76 espécies minerais brasileiras já foram identificadas [1], um número bastante baixo, considerando as dimensões continentais de nosso país. Esta pesquisa, portanto, visa contribuir com os objetivos do Centro de Caracterização de Espécies Minerais (CCEM), um projeto iniciado em parceria com grupo de Cristalografia do IFSC e que já caracterizou mais de uma dezena de novos minerais.

Como ela é feita

As amostras são adquiridas através da colaboração de nosso grupo com museus, colecionadores, mineradoras e centros de pesquisa em geociências nacionais e internacionais e que já renderam publicações importantes [2].

As principais técnicas analíticas empregadas serão a de difração de raios X (DRX) de pó e de monocristal, microsonda eletrônica (EDS e WDS) e espectroscopia Raman, que são fundamentais para a descrição completa de espécies minerais conforme a Associação Mineralógica Internacional (IMA). Como técnicas complementares serão empregadas ainda a espectroscopia dispersiva de raios X acoplada à microscopia eletrônica de varredura (MEV-EDS) e a fluorescência de raios X (FRX), que fornecem informações sobre a composição elementar que são valiosas para a interpretação dos difratogramas de pó e dos espectros Raman. A partir dessas técnicas investigam-se propriedades químicas (como composição, concentração, teor), estruturais (arranjo cristalino, substituições químicas e desordem) e espectroscópicas (interação da radiação com a matéria e propriedades óticas) das amostras.

Resultados

Para a primeira etapa foram selecionadas amostras minerais do Estado do Amapá, que possui mais de 70 anos de atividade mineradora em escala industrial, representando a maior parcela do PIB, porém com um histórico de atividade garimpeira que remonta ao século XVI [3].

Algumas modificações superficiais roxas foram encontradas em amostras de caulim da Mina Morro do Felipe no sul do estado do Amapá (Figura 1). Devido à pequena quantidade de amostra, um método inovador foi aplicado utilizando um equipamento de DRX de monocristal para analisar amostras em pó. O equipamento utilizado foi o RIGAKU Synergy-S, atualmente o mais moderno do seu tipo na América Latina. Para analisar a composição elementar e ajudar a identificar as fases cristalinas, a FRX foi realizada e confirmou a dominância de Si e Al, típica de argilominerais, e indicou a presença de Fe e Ti. A espectroscopia Raman confirmou a presença de Fe e Ti nas fases cristalinas de hematita e anatase. O quartzo também foi detectado.

O refinamento Rietveld (Figura 2) na porção branca (Rwp=7,83%) indicou 86% de caulinita e 14% de quartzo. Na porção roxa, o refinamento (Rwp=13,13%) indicou 86,7% de caulinita, 10,8% de hematita e 2,4% de anatase. A cor púrpura é atribuída ao efeito óptico dos muitos pequenos pontos de hematita disseminados na amostra, com menor contribuição de cristais de quartzo e anatase.

Estágio atual e perspectivas

Encontram em diferentes estágios de avanço, os seguintes estudos: a caracterização de rejeito industrial de caulim, a fim de buscar aplicações tecnológicas para este material; a caracterização de argila vermelha e cinzas de caraipe da comunidade de Maruanum, no Estado do Amapá, visando elucidar problemáticas ligadas à antropologia; as análises de cerâmicas arqueológicas indígenas amazônicas, particularmente do Sítio Ilha Mirim, em Macapá-AP, Brasil; e a caracterização de amostras de minerais do grupo da romeíta brasileiros obtidos da cidade de Ouro Preto-MG, Brasil, com o intuito de determinar uma nova espécie ou ocorrência mineral. Há grande possibilidade de descoberta de novas espécies minerais.

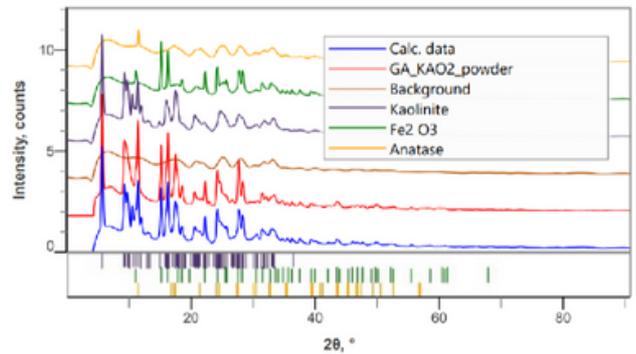


Figura 2: Difratograma e refinamento de Rietveld para P2. Foram identificadas as fases caulinita ($86,72 \pm 0,04\%$), hematita ($10,84 \pm 0,03\%$) e anatase ($2,44 \pm 0,03\%$). Rwp=13,13%, Rp=9,85%, S=0,1043 e $X^2=0,0109$.

REFERÊNCIAS

- [1] ATENCIO, D. Type mineralogy of Brazil. São Paulo: Universidade de São Paulo, Instituto de Geociências, 2020.
- [2] LOPES, G. A. C. et al. Minerals, v. 11, n. 12, p. 1409, 2021.
- [3] OLIVEIRA, M. J. de (org.). Diagnóstico do setor mineral do Estado do Amapá. Macapá: IEPA, 2010.

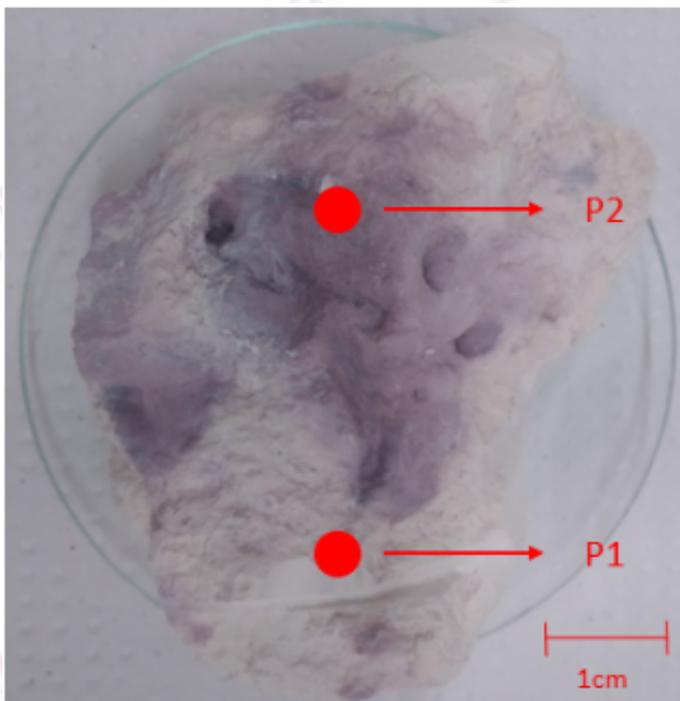


Figura 1: P1: branca - caulinita, porção inalterada; P2: roxa - caulinita + material "titanoferroso", porção alterada.

Mensagem final

Letícia Martinelli & Yvonne Primerano Mascarenhas

Yvonne Mascarenhas acredita que a vida do Instituto de Física de São Carlos não depende apenas dos docentes. Ela ressalta que "O futuro depende dos jovens que estão entrando em todas as áreas da ciência. Eles precisam ser muito bem recebidos, estimulados, e tudo que pudermos fazer para melhorar a formação e o interesse deles é muito importante." Ela até mesmo compara o convívio de docentes e alunos com um bioma, onde deve existir num centro de ciência e pesquisa e afirma que nosso Instituto é um exemplo disso e possui todas as partes ativas. Yvonne também diz que nesse bioma, a relação das partes deve ser estimulante, cordial, e até mesmo afetiva. Suas palavras de encorajamento dizem "Que os professores sejam queridos e admirados e os alunos considerados filhos intelectuais. Que a segunda geração seja melhor que a primeira." Que sejamos inspirados com tais palavras!



SIFSC13

Comissão Organizadora - SIFSC 2022

Adonai Hilario
Arthur Deponte Zutião
Elisa Iahn Goettens
Gabriel dos Santos A. Pinto
Henrique Castro Rodrigues
Jefer Santiago Mares
João Victor Pimenta
Julia Martins Simão
Letícia Martinelli
Lorany Vitoria dos Santos Barbosa
Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio
Natasha Mezzacappo
Paulina Ferreira
Vinícius Pereira Pinto
Willian dos Santos Ribela

Comentários, críticas e sugestões serão sempre bem-vindos e podem ser enviados ao e-mail sifsc@ifsc.usp.br.

Nos acompanhe também nas nossas redes sociais:

