

**IX ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA
DA MATÉRIA CONDENSADA**



Poços de Caldas/MG, 23 a 26 de Abril de 1986

SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

IX ENCONTRO NACIONAL
DE FÍSICA
DA MATÉRIA CONDENSADA

PROGRAMA
E
RESUMOS

IX ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

Comissão Organizadora:-

Prof. Adalberto Fazzio - IFUSP (Coordenador)

Prof. Henrique G.P.Lins de Barros - CBPF

Prof. José Suassuna Filho - UNICAMP

Prof. Wido Schreiner - UFRGS

Fontes Patrocinadoras:-

FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos

FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

Mangels Industrial S/A

ÍNDICE

I	-	Introdução.....	pág. 1
II	-	Mapas das Dependências Interiores do Hotel.....	3
III	-	Quadro de Participantes por Grupo de Trabalho.....	6
IV	-	Siglas dos Grupos de Trabalho.....	7
V	-	Programação das Atividades do IX ENFMC.....	9
		V.1 - Horário.....	11
		V.2 - Distribuição das Salas entre os Grupos de Trabalho.....	14
		V.3 - Conferência e Palestras Convidadas.....	15
VI	-	Resumos dos Trabalhos.....	17
		VI.1 - Materiais Amorfos.....	19
		VI.2 - Física Atômica e Molecular.....	27
		VI.3 - Biofísica.....	39
		VI.4 - Cristalografia.....	49
		VI.5 - Defeitos, Crescimento e Caracterização de Cristais.....	59
		VI.6 - Física Estatística e Fenômenos Críticos.....	71
		VI.7 - Instrumentação.....	89
		VI.8 - Cristais Líquidos.....	99
		VI.9 - Magnetismo.....	107
		VI.10 - Ciência dos Materiais/Propriedades Mecânicas	117
		VI.11 - Metais e Ligas.....	125
		VI.12 - Ótica.....	137
		VI.13 - Ressonância Magnética.....	163
		VI.14 - Semicondutores.....	173

BIO - 01

INFLUÊNCIA DA HISTIDINA DISTAL NA SIMETRIA DO LIGANTE NO E SUA ESTABILIDADE

TÉRMICA. Otaciro Rangel Nascimento, Ignez Caracelli, Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, C.P.369, 13560 São Carlos, SP.

A ligação do grupo NO na sexta coordenação do íon ferro em Mioglobinas e Hemoglobinas tem sido amplamente utilizada para obtenção de informação de simetria nestas moléculas no estado Fe^{2+} , spin nulo. A vantagem de se utilizar o grupo NO no lugar de O_2 está no fato do grupo Nitrosil ser paramagnético e poder ser observado pela técnica de RPE. Neste trabalho está sendo mostrado que existem dois estados de simetria possíveis que estão em equilíbrio térmico e são estáveis em uma faixa muito ampla de temperatura. A temperatura de transição de um estado para outro é dependente do resíduo de amino-ácido que ocupa a posição da histidina distal (vizinhança da sexta coordenação) o que pode ser visto por medidas com diferentes Hemoproteínas. No caso presente foram usados Mioglobina de Aplysia Brasileira e Hemoglobina de Glossoscolex Paulistus. Este estudo está estendido para mioglobinas de Baleia e de Cavalo.

Apoio Financeiro: CNPq, FINEP e FAPESP.

BIO - 02

O PAPEL DA ÁGUA NA CONFORMAÇÃO DA PROTEÍNA MIOGLOBINA: UM ESTUDO POR RPE, La-

dislau Martin Neto*, Rosemary Sanches, Marcel Tabak, Sergio Mascarenhas e Otaciro R. Nascimento. Instituto de Física e Química de S. Carlos, USP, S. Carlos, Brasil. *FAPESP.

A estrutura desidratada de uma molécula biológica não é suficiente para explicar a sua ação, isto porque a água interage com os resíduos hidrofílicos e polares mudando sua conformação que é determinante na sua função. No presente trabalho observamos as variações de simetria do centro ativo (heme) da metamioglobina (metaMb) equina moduladas pelo grau de hidratação. Utilizou-se também ApoMioglobina (ApoMb) para verificar se um radical livre formado na desidratação, dependia só da globina e não do grupo prostético. Amostras liofilizadas foram utilizadas e o sinal de RPE do íon ferro(III) e do radical livre monitorado. Para a metaMb o espectro de RPE é caracterizado por linhas de absorções com valores de $g \sim 6$; $g = 4,3$; $g \sim 2$ e também a linha do radical livre com $g = 2,01$. Para a ApoMb observou-se uma única linha de absorção com valor de $g = 2,01$.

Observou-se na metaMb que a variação da largura de linha em $g \sim 6$ com a hidratação decresce exponencialmente até um valor de 0,2 gr H_2O /grMb e mostrando pequena variação acima dessa hidratação. Duas possibilidades podem explicar este comportamento: 1) a simetria do íon ferro(III) na proteína é sensível a mudanças conformacionais induzidas pela variação no conteúdo de água; 2) a variação é devido ao estreitamento de linha provocado pelo aumento do grau de liberdade com o crescimento da hidratação. Constatou-se também que a presença do radical livre criado pela desidratação é independente do grupo prostético.

BIO - 03

ESTUDO DE E.P.R. A BAIXA TEMPERATURAS DE MET-HEMOGLOBINA $-N_3$

INTACTA E DESNATURADA. E. Wajnberg (Deptº de Física-PUC/RJ), H.J. Kalinowski (Deptº Eng. Telecomunicações - UFF) e G. Bemski (CBPF).

Pretendemos verificar o efeito da mudança conformacional da proteína sobre o parâmetro de dimensão fractal, d , quando uma solução de met-hb- N_3 em 50% de glicose é submetida a tratamento térmico para desnaturação (5min a 80°C). O parâmetro d pode ser obtido da dependência do tempo de relaxação spin rede, T_1 , com a temperatura (T_1^{-1} a T_2^{d+3}) num processo Ramachandran para o estado de spin baixo do Fe^{3+} verificamos que a temperaturas menores que 20K, a solução met-hb- N_3 não apresenta puramente um estado de spin baixo, mas uma fração de 0.04 de spin alto. O processo de desnaturação aumenta esta fração para 0.31 que deve estar associada a variação de campo cristalino para região de campos menores que o valor crítico Δ_c para o qual os dois estados de spin têm mesma energia. Nos casos onde existe a mistura de estados de spin, o mecanismo de relaxação do estado de spin baixo não pode ser interpretado em função do parâmetro d , porque para temperaturas menores 12.8±1.5K existe a contribuição de um processo Orbach via estado de spin alto. Os valores do desdobramento a campo zero Δ obtidos a partir da dependência de T_1 no processo Orbach para proteína desnaturada (T_1 a $e^{-\Delta/RT}$) estão de acordo com o calculado a partir da variação de intensidade da linha de EPR com temperatura.

(vide verso)