

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

MEMBROS DO CONSELHO DE ADMINISTRAÇÃO DA ABTLuS

Rogério Cezar de Cerqueira Leite
(Presidente)

Adalberto Vasquez

Carlos Alberto da Silva Lima

Celso Varga

Celso Antônio Barbosa

Cláudio Rodrigues

Cylon E. T. Gonçalves da Silva

Fernando Cláudio Zawislak

Marcelo Juni Ferreira

Roberto Nicolau Jeha

Waldimir Pirró e Longo

DIRETORIA DA ABTLuS

Diretor Geral

José Antônio Brum

Diretor Associado

Pedro Fernandes Tavares

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

CONTEÚDO

A. SUMÁRIO EXECUTIVO	7
B. PRINCIPAIS RESULTADOS DE 2003	10
1. P, D & I com Luz Síncrotron	12
1.1 Fonte de Luz Síncrotron	12
1.2 Manutenção das Linhas de Luz	16
1.3 Melhoramentos nas Linhas de Luz	19
1.4 Implementar Novas Linhas de Luz	22
1.5 Uso das Linhas de Luz	23
2. P, D & I em Micro e Nano-Tecnologia	28
2.1 Manutenção da Infra-estrutura	28
2.2 Melhoramentos da infra-estrutura	29
2.3 Apoio aos Pesquisadores Externos	30
3. P, D & I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia	34
3.1 Manutenção e Melhoria da Infra-estrutura	34
3.2 Apoiar Pesquisadores Externos com a Infra-Estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia	35
3.3 Pesquisa Realizada por membros do CeBiME em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia	41
4. P, D & I em Aceleradores	42
4.1 Melhoramentos no Anel de Armazenamento	42
4.2 Dispositivos de Inserção	44
5. Transferência de Tecnologia	48
6. Informação, Educação E Divulgação	50
6.1 Informação Científica e Administrativa	50
6.2 Educação e Produção Científica	51
6.3 Divulgação	57
7. Gestão e Planejamento	58
7.1 Relatório Financeiro	58
C. INDICADORES DE DESEMPENHO	62
D. CONCLUSÃO	74
E. APÊNDICES	77
E.1 Publicações	78

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

E.2	Notas Técnicas -----	96
E.3	Relatório do Comitê Científico -----	98
E.4	Resposta as Recomendações do Comitê Científico -----	129
E.5	Parecer dos Auditores Independentes -----	135

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Parâmetros de Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron em 2003 -----	14
Tabela 2	Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2003 -----	14
Tabela 3	Linhas de Luz do LNLS em Operação para Usuários -----	18
Tabela 4	Melhoramentos nas Linhas de Luz -----	19
Tabela 5	Linhas de Luz do LNLS em Construção ou Projetadas -----	22
Tabela 6	Distribuição Geográfica das Propostas de Pesquisa nas Linhas de Luz -----	23
Tabela 7	Propostas de Pesquisa nas Linhas de Luz -----	24
Tabela 8	Resumo dos principais parâmetros de uso da FLS -----	27
Tabela 9	Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede de Biologia Molecular Estrutural do estado de São Paulo --	37
Tabela 10	Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural -----	38
Tabela 11	Pesquisadores da ABTLuS -----	53
Tabela 12	Alunos de pós-graduação sob orientação -----	54
Tabela 13	Pós-doutores sob supervisão -----	55
Tabela 14	Cursos realizados durante o primeiro semestre de 2003 -----	56
Tabela 15	Recursos Totais ABTLuS -----	60

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

LI STA DE GRÁFI COS

Gráfico 1	Confiabilidade da Fonte de Luz Síncrotron -----	15
Gráfico 2	Tempo de vida médio do feixe -----	15
Gráfico 3	Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron -----	16
Gráfico 4	Histórico dos Auxílios concedidos -----	26
Gráfico 5	Evolução do números de Propostas de Pesquisas nas linhas de luz -----	26
Gráfico 6	Horas de operação por microscópio -----	28
Gráfico 7	Distribuição das proposta de pesquisa do LME -----	31
Gráfico 8	Perfil dos Usuários no LME -----	31
Gráfico 9	Perfil dos Usuários do LMF -----	33
Gráfico 10	Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear 600 MHz -----	40
Gráfico 11	Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear 500 MHz -----	40
Gráfico 12	Evolução das Publicações -----	52
Gráfico 13	Orçamento do Contrato de Gestão ABTLuS -----	58
Gráfico 14	Repasses e Gastos do período de janeiro a dezembro de 2003 -----	59
Gráfico 15	Perfil do Quadro Funcional da ABTLuS	61

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Nova Linha de Luz de Difração de Raios x em policristais – XPD -----	17
Figura 2	Novo Sistema de RF do anel de armazenamento -----	43
Figura 3	Dispositivo Wiggler multipolar híbrido -----	45
Figura 4	Protótipo da câmara do wiggler -----	46
Figura 5	Bancada de Caracterização de dispositivo de inserção -----	47

A. SUMÁRIO EXECUTIVO

O ano de 2003 caracterizou-se por uma redefinição de estratégias por parte do Ministério de Ciência e Tecnologia, algumas das quais afetaram as atividades da ABTLuS, exigindo uma reorganização de algumas atividades e definição de prioridades no Laboratório.

Dentre as principais realizações do ano de 2003 destacam-se:

1. A conclusão do comissionamento e abertura para os usuários da linha de luz de absorção dispersiva (*DXAS*). Esta é uma linha de luz singular, existindo poucas no mundo, oferecendo assim condições diferenciadas para os usuários do LNLS.
2. Comissionamento da linha de luz de difração de Raios-X em policristais (*XPD*). Esta linha de luz vem atender a uma antiga demanda da comunidade científica e estará operacional para os usuários já no 1º. semestre de 2004.
3. A introdução de um novo modo de operação da fonte de luz síncrotron: o modo *single-bunch* ou modo de operação em pacote único. Neste modo é possível realizar experimentos com características temporais na ordem de nanosegundos, aumentando assim o escopo dos experimentos possíveis de serem realizados no LNLS.
4. A confiabilidade da Fonte de Luz Síncrotron que atingiu 98% superando o valor pactuado, confirmando a possibilidade de operar a máquina em regime de operação contínua.
5. Finalização do processo de aquisição do dispositivo “*Wiggler Multipolar Híbrido*”, com recurso da FAPESP. Este dispositivo é essencial para a instalação da linha de luz de cristalografia de proteínas por técnica MAD, essencial para o programa de Biologia Molecular Estrutural.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

6. A instalação do Laboratório de Filmes Finos, utilizando os equipamentos cedidos pelo CPqD. Este laboratório operará como uma instalação aberta, multi-usuária, permitindo a comunidade científica e tecnológica ter acesso a algumas técnicas de crescimento de materiais, uma das principais dificuldades existentes hoje na pesquisa no Brasil.
7. A conclusão da instalação do Laboratório de Espectroscopia de Massa. Os primeiros experimentos já estão sendo realizados. Este laboratório funcionará como instalação aberta, multi-usuária, e permitirá a realização de estudos proteômicos.
8. O início da operação efetiva da Rede Nacional de Biologia Molecular, embora com recursos limitados, tendo já sido realizado um curso de treinamento e vários trabalhos no CeBiME envolvendo pesquisadores da Rede.
9. O início da operação do Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear como instalação aberta, multi-usuária, permitindo o acesso a pesquisadores do Brasil e da América Latina a esta técnica.
10. Realização do curso multidisciplinar “Introdução às Técnicas Experimentais no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron”, na graduação da Universidade Estadual de Campinas, utilizando as instalações de pesquisa do LNLS.
11. A execução de 358 propostas de pesquisas nas linhas de luz e 96 no laboratório de microscopia eletrônica e 2 no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, totalizando 456 propostas de pesquisa nas diversas instalações abertas do LNLS. Estes trabalhos representaram a vinda no LNLS de aproximadamente 800 pesquisadores de outras instituições de pesquisa do Brasil e do mundo para realizarem suas pesquisas.
12. A realização da XIII Reunião Anual de Usuários, com mais de 300 participantes inscritos com a apresentação de mais de 200 trabalhos científicos realizados com uso das instalações disponíveis no LNLS.
13. A publicação de 137 artigos em revistas indexados por pesquisadores que utilizaram a infra-estrutura do LNLS;

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

14. A realização do 12o. Programa de Verão com 15 estudantes desenvolvendo projetos científicos nas instalações do LNLS.
15. A realização da 5a. reunião do Comitê Técnico-Científico do LNLS.

Entre as principais dificuldades encontradas durante o ano de 2003, destacamos:

1. A limitação nos valores do orçamento contratado nos Termos Aditivos para a atividade em Biologia, que atingiu 62% do limite previsto na Lei Orçamentária.
2. A irregularidade no repasse dos recursos financeiros, em geral, e a não efetivação do total contratado para a atividade relacionada à Fonte de Luz Síncrotron – principal alínea orçamentária da ABTLuS, ficando 6% como “restos a pagar”.
3. O adiamento das atividades relacionadas ao Programa Nacional de Nanotecnologia do MCT, as quais ficaram limitadas às Redes de Nanotecnologia do CNPq, dificultando o melhor aproveitamento do LNLS nesta área.
4. O funcionamento precário da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural, coordenada pela ABTLuS juntamente com o CNRMN/UFRJ, devido ao corte orçamentário da atividade de Biologia.
5. O atraso e não efetivação da Rede Nacional de Proteoma, o que dificultou o pleno aproveitamento do Laboratório de Espectroscopia de Massa, instalado com o apoio da FAPESP.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

B. PRINCIPAIS RESULTADOS DE 2003

O objetivo deste Relatório Anual é descrever de forma analítica as principais realizações do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron – LNLS, operado pela organização social Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron – ABTLuS, por meio do Contrato de Gestão firmado com o Ministério de Ciência e Tecnologia – MCT e o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, desde 1998 e renovado em 2002.

O LNLS é hoje um complexo de laboratórios científicos e tecnológicos, centrado na única fonte de luz síncrotron do Hemisfério Sul, e complementado por vários laboratórios, onde destacam-se as instalações de micro- e nanotecnologia e o Centro de Biologia Molecular Estrutural – CeBiME. Entre estes laboratórios, vários operam de forma aberta, multi-usuária, destacando-se as linhas de luz (11 em operação para usuários em 2003), o Laboratório de Microscopia Eletrônica – LME e o Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear – LRMN, além de vários laboratórios de apoio e de pesquisa.

A ABTLuS está focalizada em 3 Macro-Objetivos:

1. Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.
2. Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios do mundo.
3. Implantar e gerir a infra-estrutura da ABTLuS visando ganhos de eficiência e eficácia mediante novos mecanismos de gestão e informação e difusão de Ciência, Tecnologia e Inovação.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2003**

As metas estabelecidas no planejamento para 2003 são avaliadas através de 18 Indicadores (um em caráter experimental). As atividades são organizadas em 8 Programas:

- P1. Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação com Luz Síncrotron
- P2. Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação em Micro- e Nanotecnologia
- P3. Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação em Biologia Molecular e Biotecnologia
- P4. Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação em Aceleradores e Instrumentação
- P5. Transferência de Tecnologia
- P6. Informação, Educação e Divulgação
- P7. Gestão e Planejamento
- P8. Manutenção e Melhoramentos

Em nível nacional, o ano de 2003 teve várias redefinições de prioridades e programas científicos e tecnológicos, alguns dos quais atingiram diretamente as atividades do LNLS. Os repasses financeiros do Contrato de Gestão foram irregulares, não sendo inteiramente integralizados. Apesar deste conjunto de incertezas, o ano de 2003 apresentou uma maior estabilidade do que o de 2002 e foi possível retomar as atividades e um certo grau de investimento necessário nas instalações experimentais que haviam sido postergados devido às perturbações econômicas de 2002.

A seguir, descrevemos as principais atividades e os resultados do ano de 2003, de acordo com os Programas de Atividades da laboratório.

1. P, D & I com Luz Síncrotron

1.1 – Fonte Luz Síncrotron

Nos 10 primeiros meses de 2003, a fonte de luz síncrotron operou de forma contínua, exceto por uma parada de três semanas no mês de junho para instalações preparatórias da ampliação do sistema de Rádio-Freqüência - RF do anel de armazenamento. Esta ampliação foi implementada durante a parada de máquina nos meses de novembro e dezembro. Foram fornecidas 3.995 horas de feixe para usuários, sendo 3.869 horas durante turnos programados e 126 horas em turnos extraordinários (Tabela 1 e Tabela 2), ultrapassando a meta prevista de 3.000 horas programadas para o ano. Dando prosseguimento à bem sucedida experiência do segundo semestre de 2002, em 2003 a fonte de luz operou em regime contínuo, funcionando 24 horas por dia nos dias de semana e interrompendo o serviço aos usuários somente nos fins de semana. Neste período, foram registradas 80 horas de falhas durante o horário programado, resultando num índice de confiabilidade de 98%, ultrapassando o índice de 93% pactuado para este ano e confirmando a possibilidade de operar a máquina em regime de operação contínua.

Uma novidade importante introduzida em 2003 foi o oferecimento aos usuários de um novo modo de operação da fonte de luz síncrotron: o modo *single-bunch* ou modo de operação em pacote único. Neste modo de funcionamento (que é solicitado por pesquisadores interessados em espectroscopia de tempo de voo e outras técnicas resolvidas no tempo), apenas um entre 148 possíveis pacotes de elétrons são efetivamente preenchidos. A corrente média total armazenada no anel neste modo é obviamente muito menor que no modo convencional de operação (modo com muitos pacotes ou *multi-bunch*), ainda que a corrente por pacote seja muito maior. Os dois modos são mutuamente exclusivos e os turnos agendados para o modo *single-bunch* podem ser usados com eficácia apenas por algumas linhas de luz. Em função disso e tendo em vista a grande demanda

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

por tempo de feixe no modo convencional, o agendamento de turnos em modo *single-bunch* foi feito em 2003 de forma a concentrar todos os usuários nele interessados em um único período de duas semanas do mês de março quando foram dedicadas à operação *single-bunch*, atendendo a solicitação de três diferentes grupos de pesquisa (um grupo da UNICAMP/LNLS, um grupo da UFRJ e um grupo da UFSCar), um total de 190 horas de feixe no modo *single-bunch* tendo sido alcançado um índice de confiabilidade de 95,9%, muito próximo dos valores típicos no modo *multi-bunch*. A única diferença operacional importante para os usuários neste modo foi um alongamento do tempo de injeção tipicamente por um fator 2.

A introdução do modo *single-bunch* neste ano teve efeito sobre vários dos indicadores do Contrato de Gestão associados à fonte de luz síncrotron. De fato, no cálculo do número de horas-linha fornecidas, as horas de modo *single-bunch* contribuem com apenas três linhas enquanto que todas as 11 linhas estavam em operação no modo *multi-bunch*. Além disso, o novo indicador de desempenho da fonte (introduzido na tabela de indicadores do Contrato de Gestão a partir de 2002) necessitaria de revisão para poder servir de instrumento de análise no caso do modo *single-bunch*. Isto ocorre porque este indicador é definido¹ basicamente pela comparação da intensidade do feixe efetivamente entregue com uma intensidade de referência e como a intensidade no modo *single-bunch* é necessariamente muito menor que no modo convencional, uma nova referência deveria ser escolhida. Sendo este o primeiro ano em que este modo é utilizado para usuários, e considerando ainda que ele ocupa apenas uma pequena fração do tempo total fornecido, decidimos por expurgar o modo *single-bunch* do cálculo do índice de desempenho da fonte de luz síncrotron para 2003. No restante dos indicadores, no entanto (e.g., no indicador de confiabilidade), o modo *single-bunch* foi considerado juntamente com o modo *multi-bunch*).

¹ Para a definição do cálculo do desempenho (D) ver a descrição sobre os Indicadores de Desempenho neste Relatório.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

A confiabilidade da fonte manteve-se estável ao longo de todo o ano (Gráfico 1) enquanto que o tempo de vida do feixe (Gráfico 2) mostra uma redução no mês de junho associado aos efeitos da abertura da câmara de vácuo necessária na parada daquele mês em função das novas instalações do sistema de RF. O desempenho da fonte foi também afetado por esta redução no tempo de vida (Gráfico 3).

Parâmetros de Desempenho Operacional da Fonte de Luz Síncrotron. em 2003															
	Jan	Fev	Mar	Mar SB	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Med/Tot	
Corrente Inicial Média	252	250	250	10	252	250	243	248	251	251	252	-	-	250	mA
Corrente Média	149	152	156	6	155	170	130	145	154	158	163	-	-	155	mA
Tempo de Vida Médio	9.5	10.9	11.9	10.9	12.4	13.0	8.2	10.5	12.0	12.4	13.5	-	-	12	h
Corrente Integrada	59.3	51.7	29.1	1.1	70.2	66.6	16.2	72.1	67.9	74.5	82.2	-	-	591	A.h
Tempo de Feixe Programado	389	330	184	189	443	390	128	495	435	465	503	-	-	3949	h
Tempo de Feixe durante o horário programado	379	323	177	181	440	383	123	484	427	461	492	-	-	3869	h
Tempo Total de Feixe	398	339	187	190	452	392	124	497	441	472	503	-	-	3995	h
Confiabilidade	97.6	97.9	96.5	95.9	99.3	98.2	96.1	97.8	98.2	99.0	97.8	-	-	98.0	%
Desempenho	95.0	97.4	99.8	ND	100.2	105.7	86.0	94.2	99.4	101.1	104.3	-	-	99.3	%

Tabela 1: Parâmetros de desempenho da Fonte de Luz Síncrotron em 2003. Nos meses de novembro e dezembro a máquina não operou para usuários.

Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2003														
	Jan	Feb	Mar	Mar SB	Apr	May	Jun	Jul	Aug	Sep	Oct	Nov	Dec	Tot
Usuários	398	339	187	190	452	392	124	497	441	472	503	-	-	3995
Injeção	18	13	7	21	20	16	10	19	14	23	28	-	-	189
Estudos de Máquina	60	92	61	27	65	54	101	55	67	92	92	44	326	1138
Manutenção	34	47	9	18	3	41	90	8	22	9	9	292	48	631
Comissionamento	0	2	0	0	0	0	273	0	0	0	0	0	0	275
Máquina Desligada	225	172	113	97	176	233	116	153	192	120	101	384	370	2452
Falha	9	7	6	8	3	7	5	11	8	4	11	0	0	80
Total	744	672	384	360	720	744	720	744	744	720	744	720	744	8760
Grau de Saturação	70%	74%	70%	73%	76%	69%	84%	79%	74%	83%	86%	47%	50%	72%
Número de Dias	31	28	16	15	30	31	30	31	31	30	31	30	31	365

Tabela 2: Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2003.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

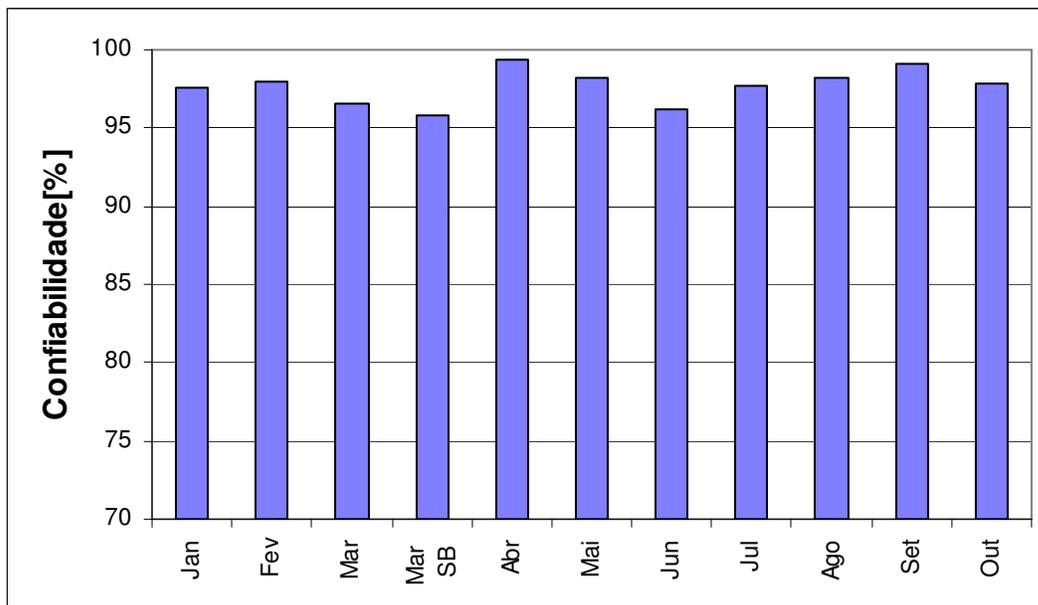


Gráfico 1: Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em operação para usuários em 2003.

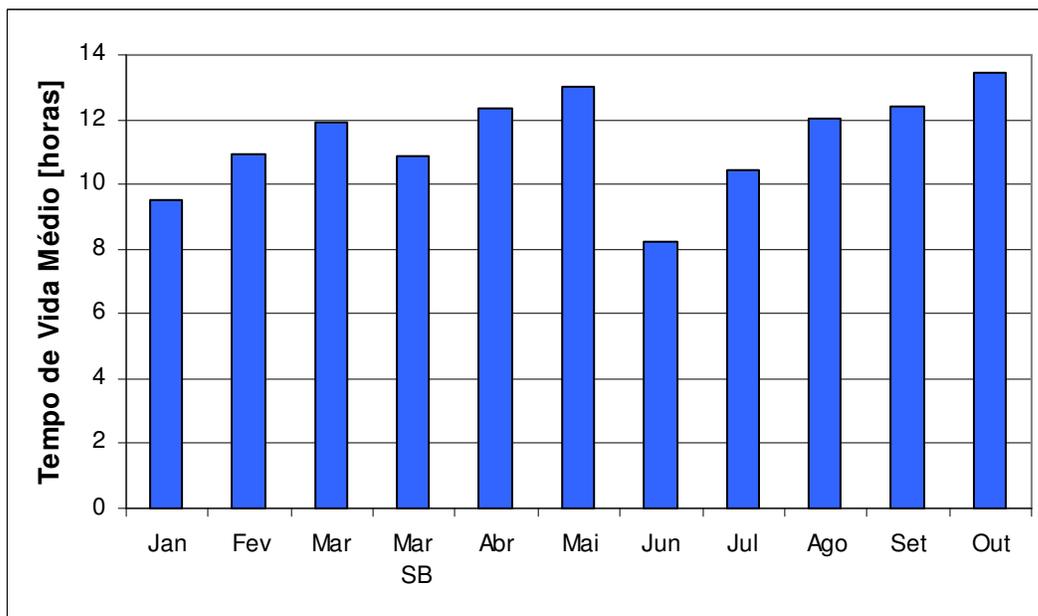


Gráfico 2: Tempo de vida médio do feixe em operação para usuários em 2003.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

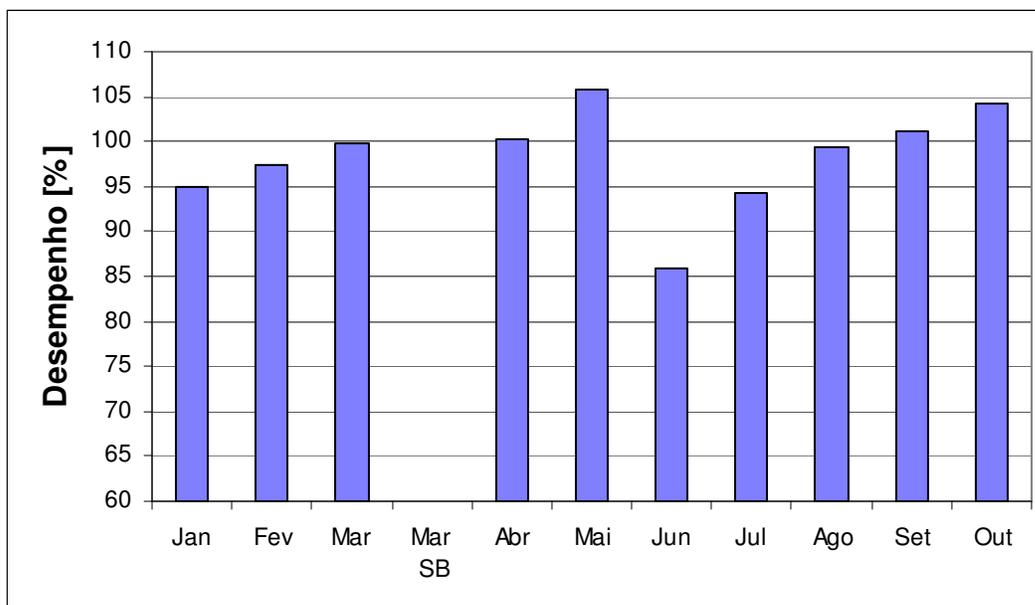


Gráfico 3: Desempenho da fonte de luz síncrotron durante operação para usuários em 2003.

1.2 – Manutenção das Linhas de Luz

Onze linhas de luz foram mantidas em operação durante o ano de 2003. Além disto, uma nova linha de luz de difração de Raios-X em policristais (da linha do dipolo D10B - XPD) foi comissionada no segundo semestre de 2003 e outra de espalhamento de Raios-X a baixo ângulo (da linha do dipolo D06A – SAXS-2) foi parcialmente construída. Sua instalação deverá estar concluída em março de 2004.

Durante o segundo semestre de 2003, a linha de luz XPD foi condicionada para que pudesse entrar em operação regular a partir do primeiro semestre de 2004. Foi testada e, quando necessário, reparada a comunicação entre o *software* de controle "Spec" e todos os motores associados ao monocromador e difratômetro. Esta é a primeira linha de luz equacionada de modo a permitir que o *software* "Spec" controle simultaneamente estes dois elementos da linha, permitindo um controle mais eficiente do experimento por parte do usuário. Finalmente, alinhou-se o monocromador de duplo cristal de Silício, e um feixe monocromático de energia 7.5 keV foi obtido, focalizado em uma tela fluorescente localizada na cabana de experimentos, i.e., perto da posição em que serão montadas as

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

amostras a serem estudadas. A parte final do comissionamento da linha de luz, incluindo a caracterização de sua performance geral por meio de amostras padrão, será realizada no período de 7 de janeiro a 6 de fevereiro de 2004. Foram agendados experimentos para usuários externos a partir de 16 de fevereiro de 2004.

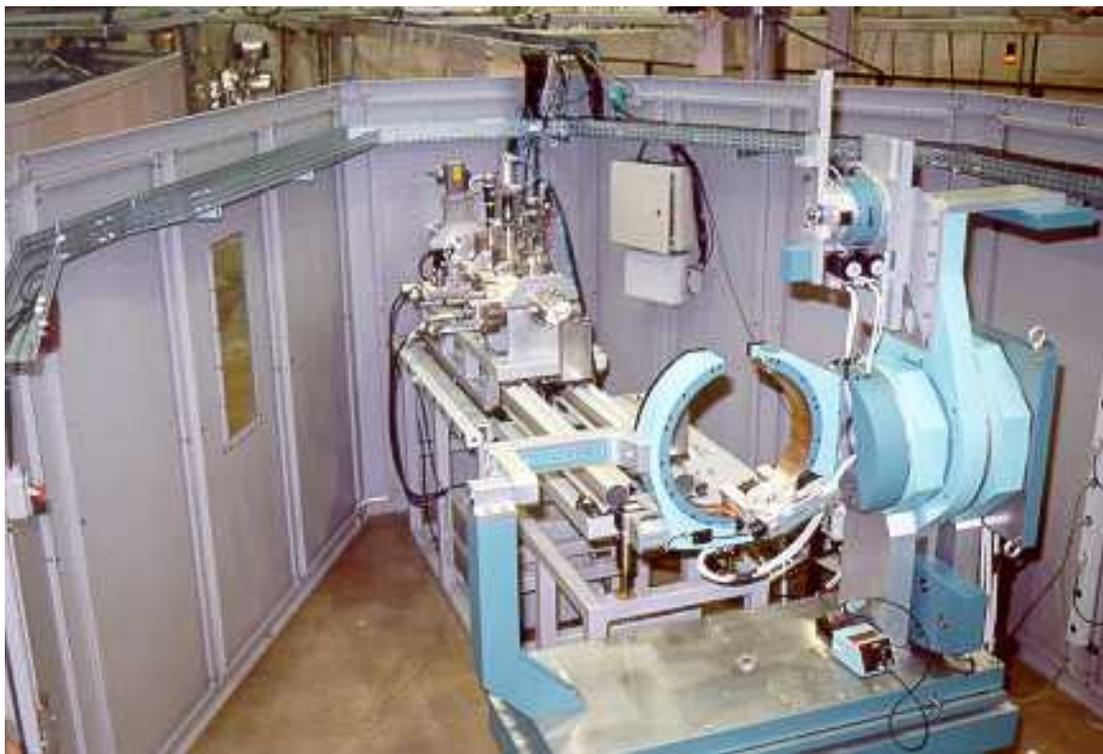


Figura 01: Nova Linha de Luz de Difração de Raios -X em Policristais – XPD.

A lista das linhas de luz em operação e em comissionamento em 2003 é apresentada na Tabela 3. A primeira coluna indica em qual dipolo do anel a linha está localizada e a sua denominação. A segunda coluna indica o monocromador e o domínio de energia para o qual a linha está otimizada. A terceira coluna indica campos de aplicações.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Linha de Luz	Monocromador	Aplicação
D10B: Difração de Raios-X em policristais (XPD)	Duplo-cristal focalizante 4 – 15 keV	Estudos estruturais por difração em policristais.
D03B: Cristalografia de Proteínas (CPR)	Cristal único curvo 6 – 12 keV	Biologia molecular estrutural. Estrutura de proteínas.
D04A: Espectroscopia de Raios-X Moles (SXS)	Duplo Cristal 0.8 – 4 keV	Espec. de fotoabsorção e fotoemissão de elétrons.
D04B: Espectroscopia de Absorção de Raios-X (XAS)	Cristal sulcado 3 – 24 keV	Ciência dos materiais, física e química; Filmes finos, óxidos e sistemas diluídos.
D05A: Espectroscopia de Ultra Violeta (TGM)	Grade toroidal (TGM) 12 – 300 eV	Superfície, átomos e moléculas; Espec. tempo de voo.
D06A: Absorção de Raios-X dispersivo (DXAS)	Cristal único focalizante 4 – 12 KeV	Ciência dos materiais, estudos <i>in-situ</i> e dicroísmo magnético.
D06B: Litografia de Raios-X (XRL)	Feixe branco filtrado 5 – 20 keV	Litografia profunda de Raios-X; Processo LIGA.
D08A: Espectroscopia de Raios-X moles e UV (SGM)	Grade esférica (SGM) 300 – 1200 eV	Superfície e interfaces; Física atômica e molecular.
D09A: Fluorescência de Raios-X (XRF)	Duplo-cristal ou feixe branco 4 – 24 keV	Meio-ambiente e geoquímica; Biofísica e agricultura.
D10A: Espalhamento e Difração de Raios-X (XD2)	Duplo-cristal focalizante 4 – 12 keV	Espalhamento magnético; Nanomateriais.
D11A: Espalhamento de Raios-X a baixo ângulo (SAS)	Cristal único curvo 6 – 12 keV	Vidros e nanomateriais, polímeros, biologia molecular.
D12A: Difração de Raios-X (XD1)	Duplo-cristal focalizante 4 – 12 keV	Difração em cristais únicos; Difração múltipla de Raios-X.

Tabela 3: Linhas de Luz do LNLS em Operação para Usuários.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

A primeira rodada de julgamento de projetos de usuários de 2003 foi realizada em maio e os projetos aprovados foram realizados no segundo semestre. A segunda rodada de julgamento de projetos foi concluída em dezembro para serem realizados no primeiro semestre de 2004.

1.3 – Melhoramentos nas Linhas de Luz

Na Tabela 4 apresenta-se vários melhoramentos ligados à instrumentação das onze linhas de luz que estiveram operando com usuários durante o ano de 2003.

Linha de Luz	Melhoramentos	Objetivo
D03B: Cristalografia de Proteínas (CPR)	<ul style="list-style-type: none">• Colocação do espelho no feixe e alinhamento dos elementos óticos da linha;• Colocação de uma nova janela de berílio refrigerada para isolar a câmara do espelho do <i>front-end</i>;• Instalação de um computador com gravador de DVD para gravar arquivos de dados do novo detetor Mar345.	<ul style="list-style-type: none">• O espelho leva a um ganho de fluxo de um fator 5;• Evitar risco de vazamento;• Permitir transferência de dados dos usuários para seu local de trabalho fixo.
D04A: Espectroscopia de Raios-X Moles (SXS)	<ul style="list-style-type: none">• Câmara para introdução de amostras comissionada;• Cristal de quartzo adquirido;• Espelho recolocado com nova cobertura de ródio.	<ul style="list-style-type: none">• Tratamento e transferência rápida de amostras;• Permitir medidas na borda do alumínio;• Aumentar a energia de trabalho da linha até 3 KeV.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Linha de Luz	Melhoramentos	Objetivo
D04B: Espectroscopia de Absorção de Raios-X (XAS1)	<ul style="list-style-type: none"> • Modificação no porta-amostra do detetor de elétrons; • Instalação de uma nova mesa experimental. • Aquisição de um novo criostato de ciclo fechado. 	<ul style="list-style-type: none"> • Facilitar alinhamento e acomodar um maior número de amostras na câmara; • Facilitar o posicionamento e alinhamento dos equipamentos de medidas; • Substituir o criostato da linha.
D05A: Espectroscopia de Ultra-Violeta (TGM)	<ul style="list-style-type: none"> • Melhorias nas eletrônicas (melhor resolução) das fendas polarizadoras, • Desenvolvidas a eletrônica e toda a interface necessária para operar em modo “<i>single bunch</i>”; • Aquisição de novos detetores MCP. 	<ul style="list-style-type: none"> • Seleção, via computador, de luz síncrotron circularmente polarizada na câmara de amostras; • Permitir medidas em função do tempo; • Permitir medidas mais rápidas dos usuários.
D06A: Absorção de Raios-X dispersivo (DXAS)	<ul style="list-style-type: none"> • Substituição do cristal focalizante. 	<ul style="list-style-type: none"> • Melhora do perfil espectral da linha.
D06B: Litografia de Raios-X (XRL)	<ul style="list-style-type: none"> • Nenhuma melhoria realizada no período. 	
D08A: Espectroscopia de Raios-X Moles e Ultra-Violeta (SGM)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de duas novas bombas iônicas no trecho de diagnóstico; • Melhorias no <i>software</i> de aquisição; • Testou-se o monitor de feixe de fótons; • Desenvolvidas a eletrônica e toda a interface necessária para operar em modo “<i>single bunch</i>”. 	<ul style="list-style-type: none"> • Recuperar o vácuo após a saída de uma câmara de amostras. • Acionar qualquer outro equipamento ao mesmo tempo; • Verificar eventuais flutuações no anel; • Permitir medidas em função do tempo.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Linha de Luz	Melhoramentos	Objetivo
D09A: Fluorescência de Raios-X (XRF)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de janela de berílio no final da linha ; • Substituição de rolamentos e fita entre translador externo e mecânica interna do monocromador. 	<ul style="list-style-type: none"> • Permitir acoplamento da câmara de vácuo da estação de reflexão externa total; • Otimizar a reprodutibilidade e performance do monocromador.
D10A: Espalhamento e Difração Magnética (XRD2)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de janelas de berílio refrigeradas; • Instalação do espelho de Raios-X para focalização meridional; • Instalação de monocromador sagital com refrigeração; • Nova cabana experimental. 	<ul style="list-style-type: none"> • Melhorar o sistema de vácuo e a segurança da linha; • Eliminação de harmônicos e ganho de um fator 5 em fluxo; Maior estabilidade e linearidade do monocromador e diminuição da carga térmica; • Melhor proteção aos usuários.
D11A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo (SAXS)	<ul style="list-style-type: none"> • Implementação e uso do calorímetro (DSC); • Desenvolvido um novo sistema de cápsulas para líquidos; • Melhorias do sistema de porta amostras da câmara WAXS/ SAXS. 	<ul style="list-style-type: none"> • Medir simultaneamente DSC e SAXS; • Permitir medidas de líquidos com capilares de 1 mm. • Medidas simultâneas de alto e baixo ângulo.
D12A: Difração de Raios X (XRD1)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação do novo monocromador focalizante na linha; • Controle de temperatura do monocromador; • Modificações na interface de controle do goniômetro <i>Huber</i>. 	<ul style="list-style-type: none"> • Possibilitar ganho em fluxo e estabilidade; • Melhorar a estabilidade em fluxo, energia do feixe; • Melhorar a interface de varreduras e coleta de dados.

Tabela 4: Melhoramentos nas Linhas de Luz (continuação).

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

1.4 – Implementar Novas Linhas de Luz

A Tabela 5 apresenta a lista das linhas planejadas, em construção ou sendo comissionadas:

Linhas de Luz	Monocromador	Aplicações	Planejamento
W01A: Wiggler multipolar para Cristalografia de Proteínas	Duplo-cristal focalizante 6 – 15 keV	Biologia molecular estrutural usando a técnica MAD.	Construir
D02A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo II	Cristal único focalizante 6 – 12 keV	Vidros e nanocristais, polímeros, biologia molecular.	Terminar construção/ Comissionar
D05B: Fluorescência UV para biologia	Espelhos para UV	Biologia molecular.	Construir
D08B: Espectroscopia de Absorção de Raios -X - II	Duplo-cristal focalizante 4 – 15 keV	Ciências dos materiais; filmes finos e sistemas diluídos.	Projetar/Construir
U11: Ondulador para Espectroscopia VUV de alta resolução	Grade plana (PGM) 100 – 1200 eV	Superfície e interfaces; Física atômica e molecular; Dicroísmo circular magnético.	Projetar

Tabela 5: Linhas de Luz do LNLS em construção ou projetadas.

As linhas em construção ou planejamento encontram-se em diferentes estágios de desenvolvimento. A linha de espalhamento de Raios-X a baixo ângulo encontra-se em fase final de construção e instalação e será colocada em comissionamento no início de 2004, como anteriormente mencionado. Para a linha de cristalografia de proteínas (W01A), o dispositivo de inserção já foi construído e chegou ao LNLS no começo de janeiro de 2004. A ótica da linha de luz já foi planejada. Para se iniciar a construção da linha, é necessário o detalhamento dos espelhos junto ao fornecedor o que é feito quando de sua aquisição, que está sendo processada pela FAPESP.

A construção da linha de fluorescência UV para biologia encontra-se novamente ativada com a aquisição dos elementos óticos pela FAPESP. A

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

linha de espectroscopia de Raios-X II, que deverá ter um fluxo dez vezes maior do que a linha I, será projetada e construída no ano de 2004, com elementos padrões já projetados para outras linhas de luz.

A linha de ondulator para espectroscopia VUV encontra-se ainda em fase final de definição de projeto, o que deverá ser realizado no ano de 2004. Os recursos para a construção desta linha ainda não foram obtidos. Apenas os recursos necessários para o protótipo do ondulator foram conseguidos através dos projetos CT-Infra I e III.

1.5 – Uso das Linhas de Luz

Durante o ano 2003 foram realizadas 358 propostas de pesquisas, por mais de 650 pesquisadores usuários (responsáveis e colaboradores) utilizando as instalações das linhas de luz.

A evolução histórica do número de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 1998 e sua distribuição geográfica, pode ser observada na Tabela 6:

Origem	1998		1999		2000		2001		2002		2003	
São Paulo	138	61%	126	75%	93	65%	112	62%	138	60%	223	62%
Outros estados	47	21%	16	9%	28	20%	42	23%	59	26%	82	23%
Outros países	41	18%	27	16%	21	15%	27	15%	34	15%	53	15%
Total	226		169		142		181		231		358	

Tabela 6: Distribuição Geográfica das Propostas de pesquisa nas linhas de luz

A distribuição dos projetos realizados durante o ano por linha de luz pode ser observado na Tabela 7:

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Linha (2003)	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	Total
Total realizado nas Linhas	53	63	66	31	27	44	16	21	5	32	358
Por país:											
Brasil	49	51	53	24	25	44	14	16	3	26	305
Argentina	4	8	10	1			2	3	2	3	33
Austrália								2			2
Chile			1								1
Cuba				4							4
Estados Unidos da América		1			2					2	5
Hungria									1		1
Itália		1	1								2
México		1	1								2
Uruguai		1		2							3
Total	53	63	66	31	27	44	16	21	5	32	358
Brasil											
Por estado / instituição:	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	Total
São Paulo	46	34	38	17	17	33	7	12	3	16	223
FAENQUIL				2							2
IPEN				1							1
LNLS	2	13	6	4	1	15	7	3	3	1	55
PUC - São Paulo								1			1
Rhodia - Paulínia			6								6
UNESP - Araraquara		1	4	1		2		1			9
UNESP - Botucatu	4										4
UNESP - Rio Claro			1								1
UNESP - São José Rio Preto	24										24
UNICAMP	1	6	5	5	14	11		5		5	52
UNIMEP										5	5
UFSCar		2	3	1	1	2					9
USP - CENA										1	1
USP - Ribeirão Preto		1	1							2	4
USP - São Paulo	5	6	5	2	1	3		2		1	25
USP- São Carlos	10	5	7	1						1	24
Rio de Janeiro		5	8		2	6	4	1		7	33
CBPF		1				4					5
FIOcruz			1								1
IME		1	1								2
INT		1									1
PUC - Rio			1								1
UERJ										3	3
UFRJ		2	5		2	2	4	1		4	20
Minas Gerais		3	3	1	4	3	2				16
UFMG		3	3	1	4	2					13
UFJF						1	2				3
Rio Grande do Sul		4	2					1			7
UFRGS		4	2					1			7
Santa Catarina		1	2	1			1	2			7
UFSC		1	2	1			1	2			7
Paraná	1				2					2	5
UEM	1										1
UEOP										2	2
UFPR					2						2
Ceará	1	1		2							4
UFC	1	1		2							4
Bahia						2					2
UESC						1					1
UFBA						1					1
Brasília	1			1							2
UnB	1			1							2
Espírito Santo		2									2
UFES		2									2
Pernambuco				2							2
UFPE				2							2
Rio Grande do Norte										1	1
UFRN										1	1
Sergipe		1									1
UFSE		1									1
Total	49	51	53	24	25	44	14	16	3	26	305

Tabela 7: Propostas de Pesquisas nas Linhas de Luz.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Por área de pesquisa :	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	Total
Biofísica	2	2	9							4	17
Biologia Molecular Estrutural	50		7								57
Bioquímica	1										1
Ciência dos Materiais		16	13	13	2	1		5	1	1	52
Ciências do Meio Ambiente		1								13	14
Engenharia de Materiais			8	5	2			1			16
Engenharia Química		3				1					4
Espectroscopia						1					1
Física Aplicada				1	2			1		1	5
Física Atômica e Molecular						10	12	2		3	27
Física da Matéria Condensada		24	10	12	17	26	3	8	2	1	103
Física Geral										2	2
Físico-química		8	18		3	5	1	4	2	2	43
Geoquímica		3									3
Instrumentação					1						1
Química Analítica		1								5	6
Química Inorgânica		5	1								6
Total da Linha	53	63	66	31	27	44	16	21	5	32	358

Tabela 7: Propostas de Pesquisas nas Linhas de Luz (Continuação).

Cerca de 85% das propostas realizadas nas linhas de luz se originaram no Brasil e 15% no exterior, com preponderância de usuários Argentinos, neste último caso.

Foram concedidos 216 auxílios, pelo Programa de Auxílio Financeiro para Pesquisadores de Instituições Brasileiras, para realização das propostas de pesquisa em 2003, contemplando a totalidade de propostas de outros Estados. O Programa de Auxílio Financeiro para pesquisadores de Instituições Latino-Americanas e Caribe, implementado em 2001, concedeu 46 auxílios para realização de aproximadamente 87% das propostas de pesquisas de outros países nas linhas de luz em 2003.

A evolução do número de auxílios concedidos pelos programas de financiamento do LNLS pode ser observada no Gráfico 4:

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003



Gráfico 4: Histórico dos Auxílios Concedidos.

Por fim, o gráfico abaixo apresenta a evolução histórica do número de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 1998:

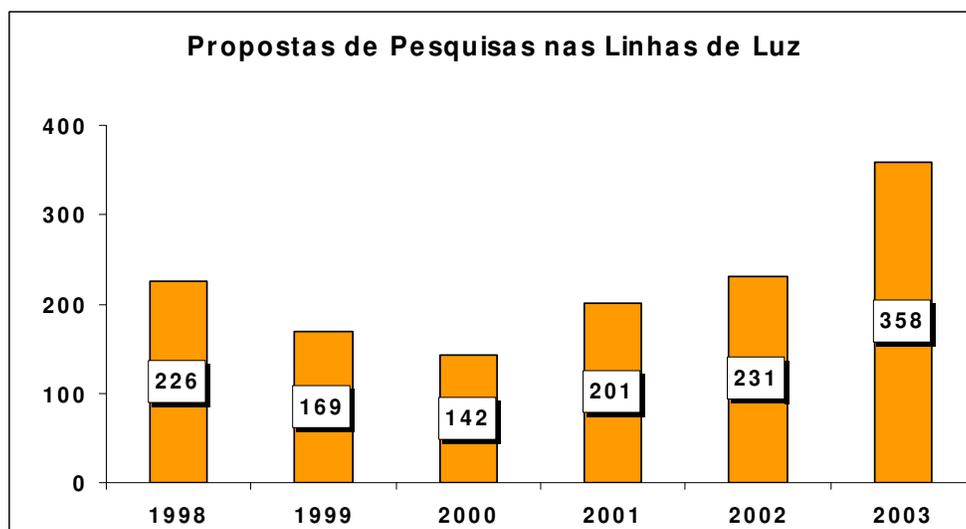


Gráfico 5: Evolução do número de propostas de pesquisas nas linhas de luz.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Um resumo dos principais parâmetros de uso e evolução da infra-estrutura relacionada a P,D&I com Luz Síncrotron pode ser observada na tabela a seguir:

	2001	2002	2003
Projetos realizados	181	231	358
Horas Linhas	23.420	32.980	40.533
Confiabilidade	94,5%	96%	98%
Linhas de luz em operação	10	10	11
Novas linhas de luz instaladas	-	1	1
Custo por hora-linha	R\$ 416	R\$ 252	R\$ 245

Tabela 8: Resumo dos principais parâmetros de uso da FLS.

2. P, D & I em Micro e Nano-Tecnologia

A infra-estrutura de pesquisa, em micro e nano-tecnologias do LNLS, esteve composta pelos seguintes laboratórios e grupos:

- Laboratório de Microscopia Eletrônica (LME);
- Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento (MTA);
- Laboratório de Microfabricação (LMF);
- Grupo de Teoria (TEO).

2.1 - Manutenção da Infra-estrutura

A infraestrutura de pesquisa em micro e nanotecnologia foi mantida operacional em 2003. Em fevereiro foi renovado o Contrato de manutenção dos três microscópios eletrônicos, custo assumido integralmente pela ABTLuS. Com mais de quatro anos de uso intenso, os equipamentos começam a apresentar problemas freqüentes, portanto um aumento leve, mas constante, do custo de operação é esperado.

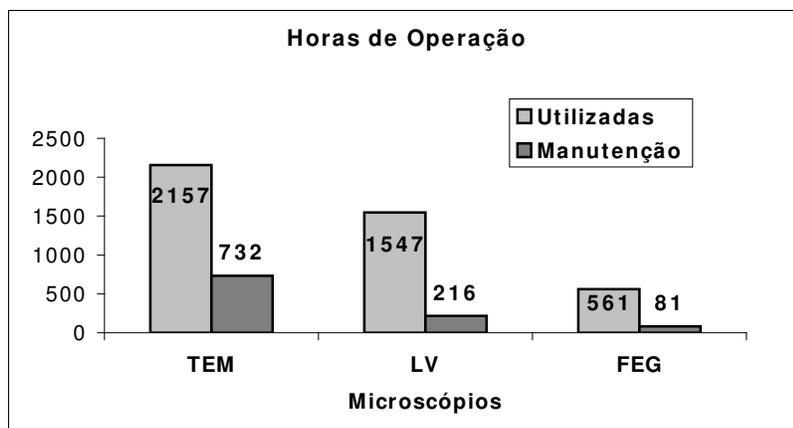


Gráfico 6: Horas de operação por microscópio.

Durante o ano de 2002 e devido a situação financeira optou-se por não adquirir peças de reposição e outros consumáveis para os laboratórios (ex. microscópios). Estes itens foram encomendados em 2003, evitando assim

comprometer o atendimento aos usuários devido a possíveis atrasos na manutenção dos equipamentos.

2.2 - Melhoramentos da Infra-estrutura

O Microscópio de Varredura em Baixo Vácuo (LV-SEM) apresentava uma limitação na operação em alto aumento devido a vibrações mecânicas, que poderiam limitar seu uso como ferramenta de litografia eletrônica. Em vista desta situação, foi realizada uma obra para a instalação do microscópio sobre um bloco de concreto de 1,5 toneladas e isolado do piso do prédio. Esta operação resultou em uma parada técnica, de duas semanas de duração no mês de maio, período em que os usuários não tiveram acesso ao microscópio. Também a fiação elétrica do laboratório foi modificada com o intuito de reduzir os ruídos eletromagnéticos que degradam a imagem quando eles operam em condições próximas da performance máxima (alta magnificação).

O Laboratório de Síntese Química é um laboratório de pesquisa interno, financiado por um Projeto Jovem Pesquisador da FAPESP. Além da sua pesquisa própria, ele deve prover também capacidade para produzir nanopartículas para diversos estudos. O Laboratório de Síntese Química foi reformado com a derrubada de paredes, duplicação da iluminação, troca do forro para possibilitar melhor circulação de pessoas e realização de trabalhos de forma mais segura. A reforma também foi necessária para instalação de nova capela que irá atender aos usuários do LME.

O Laboratório de Microfabricação do LNLS foi criado com o objetivo de fornecer equipamentos, conhecimento e infra-estrutura para a pesquisa e desenvolvimento na área de microestruturas e microdispositivos. O LMF atua como um laboratório de apoio e também como laboratório nacional aberto à comunidade científica e industrial brasileira, colocando a disposição desta um conjunto de técnicas (fotolitografia por Raios-X e ultravioleta, deposição de filmes finos metálicos e dielétricos, eletroformação de metais e

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2003**

metrologia) e infra-estrutura que permite a fabricação de uma vasta gama de protótipos.

O principal investimento realizado no LMF foi a melhoria na sala de fotolitografia. Foi substituído o forro da sala por outro mais adequado ao padrão de limpeza necessário, foram substituídos todos os filtros (absoluto e primário) dos fluxos laminares, troca das cortinas e readequação no sistema de vácuo e exaustão da sala. Esta mudança permitiu a obtenção/certificação de um ambiente de limpeza classe 100 sob o fluxo laminar. Isto possibilita ao LMF trabalhar com linhas fotogravadas de até 1 μ m.

Parte dos equipamentos do CPqD cedidos sob regime de comodato, foram utilizados para a implementação de um laboratório de filmes finos e outro laboratório de espectroscopia ótica. No primeiro, está sendo operado um sistema de *sputtering* e no sistema de elipsometria; no segundo laboratório foram implementadas as técnicas de fotocorrente, eletroluminescência e absorção. O Laboratório de filmes finos está em fase final de instalação e deverá estar disponível como laboratório de apoio e também aberto a usuários no 1^o. semestre de 2004.

2.3 – Apoio aos Pesquisadores Externos

Os microscópios eletrônicos têm sido intensamente utilizados pelos usuários. Eles se encontram próximos da saturação, o que tem sido temporariamente contornado com o aumento efetivo do horário acessível aos usuários. Durante 2003 foram realizadas 96 propostas de pesquisa no Laboratório de Microscopia Eletrônica, dos quais 82 externas e 14 internas, conforme apresentado no Gráfico 7.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Neste ano foi informatizado e incluído na *home page* do LNLS todo o sistema de submissão e análise de projetos para utilização dos microscópios eletrônicos. Como o LME é uma instalação onde os usuários tem acesso de fluxo contínuo um programa de agendamento *on-line* dos microscópio foi implementado.

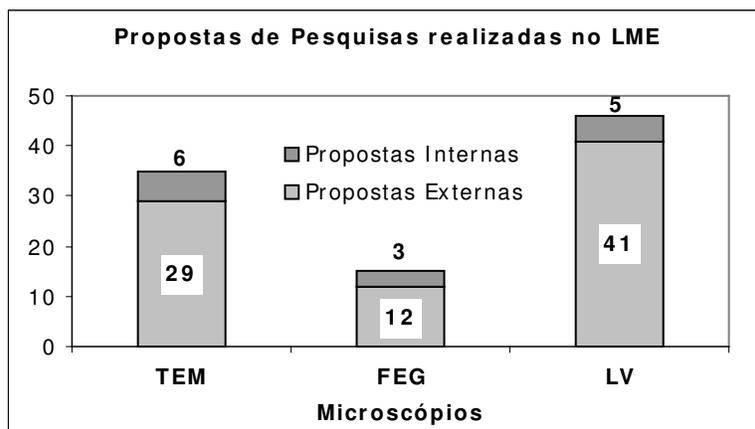


Gráfico 7: Distribuição das Propostas de Pesquisas no LME.

Neste período, o LME recebeu 87 usuários, dos quais treinou 38 no uso dos diferentes equipamentos, como vemos no Gráfico 8. Um fator importante a ser considerado é o papel do LME na formação de recursos humanos. De fato uma importante fração do tempo disponível para usuários é utilizada para treinamento, cerca de 25 % para o TEM, 14 % para o FEG e 17 % para o LV).

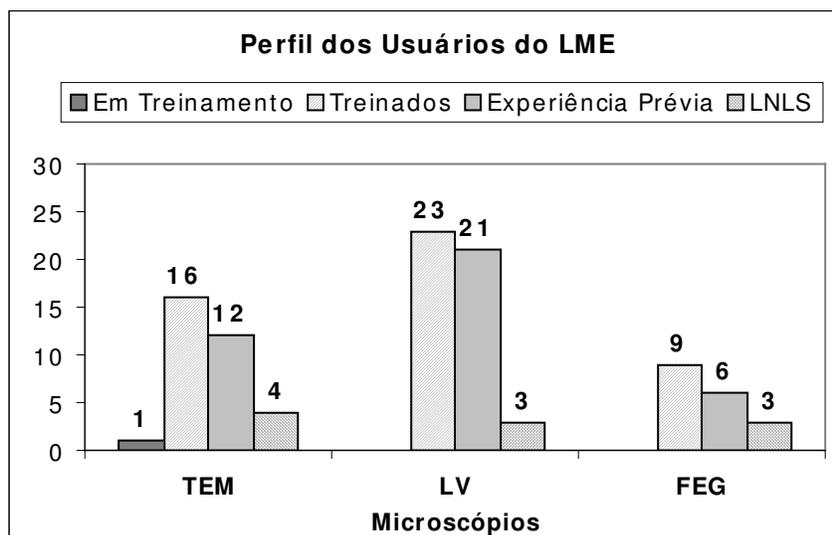


Gráfico 8: Perfil dos Usuários no LME.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Os Microscópios foram intensamente utilizados em 2003. O incremento no número de horas de operação, em relação às previstas, deve-se a utilização dos instrumentos durante a noite e finais de semana. O microscópio está operando 12 hs/dia, 6 dias por semana durante o ano todo. Esta constante pressão de usuários está produzindo um rápido desgaste do equipamento.

Dois outros microscópios encontram-se disponíveis para a utilização pelos usuários: um Microscópio de Força Atômica (AFM) e um Microscópio de Varredura por Tunelamento trabalhando em ultra-alto vácuo (UV-STM), que são operados pelo MTA. Ambos os microscópios operam por solicitação, através de submissão de projetos diretamente ao coordenador dos equipamentos. A partir de 2004 iniciará o agendamento *on-line*, procurando facilitar o acesso dos usuários e também a operacionalidade do seu uso. O UV-STM tem uma forma de operação realizada em colaboração devido à complexidade do equipamento e à duração dos projetos.

O LMF tem sido rotineiramente utilizado por 16 grupos de várias universidades e institutos de pesquisa do Brasil, contribuindo para a formação de recursos humanos altamente especializados em uma área de elevado apelo comercial. Durante este ano, foram desenvolvidos 18 diferentes projetos externos ao LNLS, contribuindo para o treinamento de cerca de 20 usuários nas técnicas disponíveis no laboratório. Usuários internos do LNLS utilizam o LMF como laboratório de apoio sem submissão de projeto.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

O tempo de uso do LMF esteve dividido entre os usuários internos, projeto externos e interação com o setor industrial, conforme demonstrado no Gráfico 9.

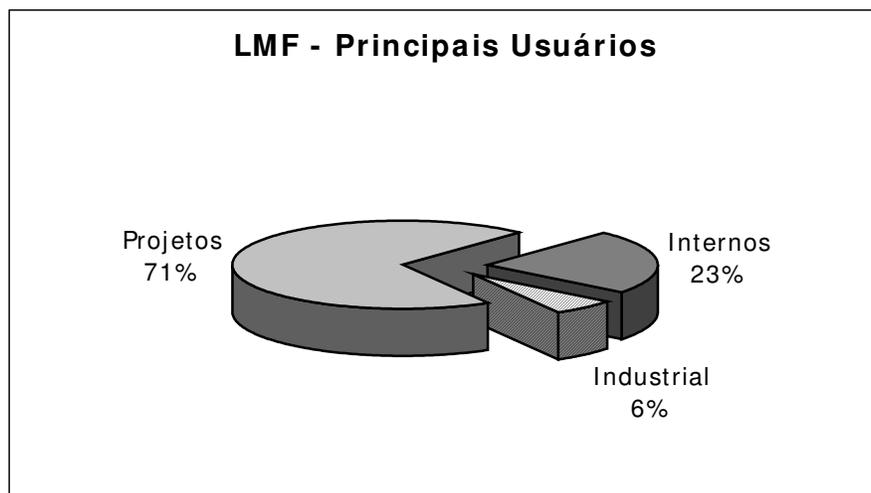


Gráfico 9: Perfil dos usuários do LMF.

Finalmente, o grupo de Teoria do LNLS tem como principal objetivo dar suporte teórico para os experimentais que utilizam as instalações de pesquisa do LNLS. Este suporte é dado na forma de projetos em colaboração ou na forma de “Rede”, envolvendo teóricos de outras instituições. Dentre os projetos em maior destaque estão o projeto sobre informação quântica, em colaboração com o Dr. Gilberto Medeiros-Ribeiro e financiado pelo convênio HP do Brasil - ABTLuS, o projeto sobre transições de fase em polímeros de cristais líquidos, em colaboração com a Profa. Nadya Silveira da UFRGS e financiado pelo convênio CAPES-COFECUB, e o projeto sobre espalhamento multipolar em metais Terras-Raras, em colaboração com o Prof. Carlos Giles da UNICAMP.

3. P, D & I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia

3.1. Manutenção e Melhoria da Infra-estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e em Biotecnologia

Este programa é desenvolvido principalmente no Centro de Biologia Molecular Estrutural (CeBiME). Os laboratórios que compõem o CeBiME foram mantidos em funcionamento normal. Além da pesquisa interna e da cooperação com pesquisadores externos, o CeBiME é o centro coordenador da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo – SmoIBNet - e co-coordenador da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural – RENABIME - juntamente com o Centro Nacional de Ressonância Magnética Nuclear (CNRMN) da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

A implantação do Laboratório de Espectrometria de Massa - LEM, com apoio da FAPESP, foi concluída no que diz respeito à instalação dos aparelhos de espectrometria de massa. Este laboratório conta com dois espectrômetros. Um deles, denominado “*Q-tof Ultima*” (*Waters-Micromass*) é um aparelho integrado de cromatografia líquida-espectrometria de massa, baseado em ionização por “*electrospray*”. O segundo aparelho, *4700 Proteomos Analyzer* (*Applied Biosystems*), é baseado na ionização por *MALDI* (*Matrix Assisted Laser Desorption Ionization*). Ambos permitem o sequenciamento de proteínas “*ab initio*” podendo ser utilizados, tanto para caracterização de proteínas isoladas como para caracterização do proteoma de microrganismos ou de tecidos ou órgãos de organismos multicelulares.

O lançamento do Projeto Proteoma, em 2003, foi suspenso devido a indefinições dos principais agentes financiadores, FAPESP e MCT, comprometendo a realização de projetos externos previstos para o LEM. Ainda assim, foram realizados no segundo semestre de 2003 dois cursos teórico-práticos de espectrometria de massa com participantes de todo o Brasil, como parte das atividades preparatórias para a formação de uma

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

Rede Nacional de Proteoma, coordenada pelo MCT. A partir de 2004 o laboratório deverá começar a operar como laboratório multi-usuário.

3.2 - Apoiar Pesquisadores Externos com a Infra-Estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia

O apoio a pesquisadores externos pelo CeBiME ocorre na forma de redes de apoio à área de Biologia Molecular Estrutural. O Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, além de participar das redes, opera como laboratório multiusuário, aberto a pesquisadores que realizarão seus experimentos de forma independente nas instalações do CeBiME. A linha de luz CPR opera como instalação experimental aberta e está descrita no Programa 1.

3.2.1 - Redes

A Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo está em operação desde o segundo semestre de 2001. Os grupos integrantes desta rede recebem apoio técnico-financeiro e realizam experimentos continuamente no CeBiME. O período que cada pesquisador da Rede passa no CeBiME, assim como as atividades que desenvolvem são variáveis e estão resumidos na Tabela 9. Um total de 48 pesquisadores ligados a Rede SmolBNet receberam auxílios para realizar experimentos no CeBiME. Destes 31 estiveram envolvidos com atividades de cristalização, coleta e análise de dados de difração de raios-X, enquanto que outras 7 pessoas estiveram envolvidas com a coleta e análise de dados de ressonância magnética nuclear. Os demais 10 pesquisadores realizaram experimentos em clonagem, expressão, purificação e análise espectroscópica de proteínas. O CeBiME também forneceu apoio para o seqüenciamento de amostras de DNA (400 amostras) para projetos vinculados à rede.

Das atividades desenvolvidas por membros externos da rede voltadas para resolução da estrutura, podemos listar 39 proteínas submetidas à cristalização no CeBiME, 16 das quais formaram cristais. Destas 16 proteínas,

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

10 estão na fase de refinamento dos cristais. Já foram coletados dados de difração na linha de cristalografia de proteínas do LNLs para seis proteínas. Uma delas já teve sua estrutura resolvida enquanto que as outras 5 se encontram em fase de análise dos dados.

Cinco proteínas e dois peptídeos estão sendo resolvidos pela técnica de Ressonância Magnética Nuclear. Para cada uma das proteínas ou peptídeos que estão sendo resolvidas por RMN um estudante está sendo treinado e o tempo de permanência destes varia de 45 dias a 6 meses.

Coordenador do Grupo	Instituição	Tipo de apoio
Clonagem, Expressão, Purificação e Espectroscopia		
Luiz Carlos de S. Ferreira	USP	Expressão, Purificação, CD
Emer S. Ferro	USP	Expressão no sistema de baculo vírus
Maria C. Bertolini	UNESP	CD; DSC
Anete P. Souza e Tomaso Yano	UNICAMP	Sequenciamento de DNA
Shaker C. Farah	USP	CD
Íscia Lopes Cendes	UNICAMP	Clonagem, expressão, purificação, CD e cristalização
Ismael G. da Silva	UNIFESP - EPM	Expressão, purificação, CD e cristalização
Sérgio Schenkman	UNIFESP	Clonagem
Paulo Arruda - Marcelo Menossi	UNICAMP	Purificação
Cristalografia		
Luís S. Netto	USP	Cristalização e coleta de dados na linha CPR
Hamza El Dorry	USP	Cristalização
Emer S. Ferro	USP	Cristalização
Carla C. Oliveira	USP	Reunião, cristalização, CD

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003**

Coordenador do Grupo	Instituição	Tipo de apoio
Walter F. Junior	UNESP	Cristalização
Anete P. Souza, Tomaso Yano	UNICAMP	Reuniões, CD, DLS, Purificação, Cristalização, coleta dados de difração
Sandro R. Valentini	UNESP	Cristalização
Sergio Schenkman	UNIFESP	Cristalização
Shaker C. Farah	USP	Cristalização e coleta de dados
Luis C. de S. Ferreira	USP	Cristalização
Walter Terra	USP	Cristalização
Ismael da Silva	UNIFESP	Cristalização
Walter F. de Azevedo Jr	UNESP – Rio Preto	Cristalografia
Ressonância Magnética Nuclear		
Shaker C. Farah	USP	RMN coleta/análise CD coleta
Anete P. de Souza	UNICAMP	RMN coleta CD coleta
Ronaldo de C. Araújo	UNIFESP	RMN coleta/análise
Sergio Shenkman	UNIFESP	RMN coleta/análise

Tabela 9: Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo.

No primeiro semestre de 2003 iniciou-se as atividades da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural, tendo sido realizada uma reunião com representantes dos grupos participantes no dia 9 de junho, além de ter sido oferecido um curso de cristalografia de proteínas de 10 a 12 de junho para 20 participantes da Rede Nacional. Os trabalhos de pesquisa da Rede Nacional já estão em andamento (ver Tabela 10) e o CeBiME está dando apoio para clonagem e expressão (4 grupos) e para cristalografia (3 grupos). Até o momento 6 proteínas de projetos da Rede Nacional foram submetidas à cristalização no CeBiME, sendo que uma delas já teve sua estrutura tridimensional resolvida e uma segunda já foi cristalizada e os dados de difração coletados.

Recursos adicionais para o funcionamento da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural, aprovados pelo CNPq em dezembro de 2002, foram liberados parcialmente no final de 2002 (R\$150.000,00), e sua parcela

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

mais importante (R\$920.000,00) apenas no final de 2003. Com estes recursos, em 2003 foi possível iniciar os primeiros trabalhos de prospecção na Rede Nacional e a realização do primeiro curso de Cristalização. Com a liberação restante dos recursos, será possível intensificar os trabalhos de pesquisa da Rede Nacional em 2004. Como parte das atividades da Rede Nacional, estão previstas reuniões de trabalho e treinamento para pesquisadores dos laboratórios da Rede Nacional.

Coordenador do grupo	Instituição	Tipo de apoio
Jorge Lulek	Univ. Est. Ponta Grossa – PR	Apoio clonagem e expressão
Lucimara Fassarella Agnez Lima	UFRGN	Apoio uso de sistema baculo vírus
Debora Foguel	UFRJ	Clonagem
Marcelo Santoro	UFMG	Clonagem
Sonia Maria de Freitas	UNB	Cristalização, coleta de dados, resolução da estrutura
Pedro Oliveira	UFRJ	Cristalização e coleta de dados
Hernán Terenzi	UFSC	Purificação e Cristalização

Tabela 10: Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede Nacional de Molecular Estrutural.

Visando ampliar e difundir a Biologia Molecular Estrutural no âmbito dos países do Mercosul, um projeto de Rede de Biologia Molecular Estrutural foi submetido dentro do programa PROSUL do CNPq envolvendo pesquisadores do CeBiME/LNLS, da UNICAMP, da Faculdade de Medicina, *Universidad de la Republica* (Uruguai) e da Faculdade de Farmácia e Bioquímica, *Universidad de Buenos Aires* (Argentina). Infelizmente o projeto não foi aprovado e não foram obtidos recursos para implementação desta Rede, a qual foi, portanto, suspensa.

3.2.2 – Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear “aberto” com tempo concedido por mérito dos projetos

A partir de maio de 2003 uma parcela do tempo do Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear - RMN passou a funcionar como laboratório aberto através da submissão de projetos e julgamento por assessores externos. Para distribuição do tempo de uso dos aparelhos, estão previstas três chamadas anuais para submissão de propostas. As propostas são avaliadas por um assessor *ad hoc* e, posteriormente por um comitê formado formado por três pesquisadores externos, auxiliados pelo coordenador do Laboratório de RMN, para avaliação final e distribuição do tempo de uso dos aparelhos por projeto aprovado.

Em 2003 foram realizadas duas chamadas para submissão de projetos, sendo avaliados no total 15 propostas. Na primeira reunião do comitê de seleção em 29 de abril foram avaliados 7 projetos dentre os quais 4 foram considerados adequados para realização no CeBiME. Na segunda reunião do comitê, em 21 de novembro, foram avaliadas 8 propostas, 2 das quais foram aprovadas. A decisão sobre as demais depende de esclarecimentos solicitados pelo Comitê aos proponentes. Os resultados demonstram a necessidade de um treinamento e divulgação sobre a técnica para melhor capacitação dos usuários. Isto está sendo estudado e deve ser implementado em 2004.

Para cálculo do tempo de uso do aparelhos de ressonância magnética nuclear são consideradas 24 horas por dia, já que em geral as coletas são feitas em período contínuo por vários dias. Os Gráficos 10 e 11 contém o resumo da distribuição do tempo dos dois aparelhos. A maior parte foi dividida entre projetos da Rede SMOLBNET, projetos em colaboração e projetos da pesquisa do grupo de RMN.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

O período de manutenção do aparelho de 600 MHz é relativamente alto pois durante os meses de Novembro e Dezembro foi realizada a substituição do magneto que apresentava perda excessiva de gás Hélio. A substituição foi feita pelo fornecedor dentro do tempo de garantia do aparelho.

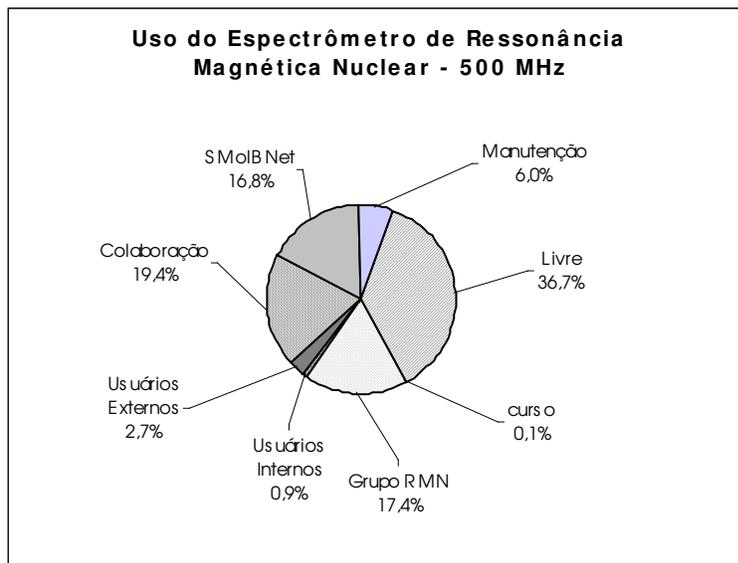


Gráfico 10: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear de 500 MHz

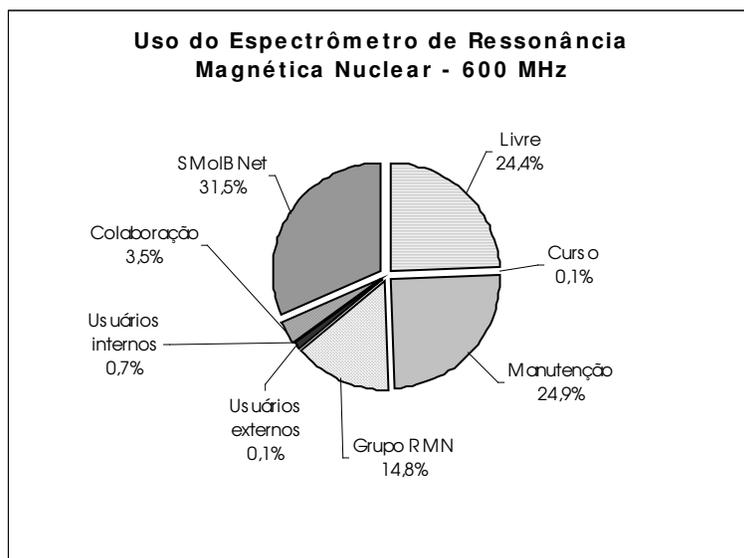


Gráfico 11: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear de 600 MHz

3.3. Pesquisa Realizada por pesquisadores do CeBiME em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia

Além das atividades descritas acima os pesquisadores do CeBiME participam do Programa FAPESP de Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão (denominado Centro de Biotecnologia Molecular Estrutural - CBME) coordenado pelo Prof. Glaucius Oliva do Instituto de Física da USP-São Carlos. Vários outros projetos encontram-se em andamento os quais foram essenciais para equipar o CeBiME e estão sendo fundamentais para manter a pesquisa e o apoio a usuários externos. Os projetos em andamento no momento com auxílio FAPESP são: 4 auxílios individuais, 3 projetos multi-usuário da FAPESP (dicroísmo circular, seqüenciador automático de DNA, 2 aparelhos de ressonância magnética nuclear de 500 e 600 MHz) e 1 projeto temático. Há também a participação de pesquisador do CeBiME num projeto, financiado pela Organização Mundial da Saúde, para caracterização de telômeros de cromossomos do parasita *Leishmania amazonensis*. Dois novos auxílios individuais foram concedidos pela FAPESP no final de 2003.

3.3.1 - Colaboração

Projetos de pesquisadores de outras instituições, nacionais e internacionais de duração mais longa e que envolvam um volume significativo de tempo e recursos dos pesquisadores do CeBiME são realizados em colaboração. Embora estes projetos tenham principalmente um caráter de colaboração científica, eles são importantes no processo de formação de pesquisadores com as técnicas de biologia molecular e estrutural. No momento existem 16 projetos em colaboração em andamento, sendo 8 em ressonância magnética nuclear, 3 em cristalografia de proteínas, 3 em expressão e análise espectroscópica de proteínas e 2 em clonagem, expressão e caracterização funcional de proteínas.

4. P, D & I em Aceleradores

4.1 - Melhoramentos no Anel de Armazenamento

Duplicação do sistema de RF do anel de armazenamento.

Esta atividade tomou a maior parte dos esforços da Divisão de Aceleradores e Instrumentação Científica em 2003 e contou com financiamento parcial de um projeto do Fundo Setorial (CT-Infra III). A duplicação do sistema de RF, iniciada ainda em 2002, é necessária em função das novas demandas sobre o sistema atual oriundas da operação em maiores correntes (desde a entrada em operação do novo síncrotron injetor em 2001) e da futura instalação de dispositivos de inserção. Após a definição de uma estratégia de ampliação em 2002, que procurou otimizar o investimento já realizado no sistema pré-existente e minimizar o número de novos componentes, em 2003 foi instalada uma segunda cavidade aceleradora (idêntica à já existente no anel) e todos os sistemas necessário à produção e condicionamento da potência de RF que alimenta esta cavidade. Nesta oportunidade reformamos também o sistema antigo, atualizando-o tecnologicamente e corrigindo falhas e limitações conhecidas.

O sistema foi concluído com sucesso e a primeira operação com feixe operando com duas cavidades simultaneamente ocorreu no final de dezembro de 2003. Ajustes finais de otimização do sistema serão feitos ao longo dos primeiros meses de 2004.



Figura 2: Novo sistema de RF do anel de armazenamento em fase final de testes. Ao alto vemos os guias de onda que conduzem a RF de alta potência às duas cavidades instaladas no trecho 5 do anel.

Melhoramentos na Blindagem da Fonte de Luz Síncrotron

Seguindo as recomendações do Comitê Técnico-Científico, ainda em 2002 foram realizados cálculos e feito o detalhamento mecânico para uma nova parede de blindagem para a fonte de luz síncrotron, objetivando permitir a permanência dos usuários no Hall experimental mesmo durante o processo de injeção. Em 2003, foi concluído o teto do síncrotron injetor e elaborado o conceito para o cobrimento do resto do anel de armazenamento. A instalação final está prevista para 2004.

Estudos de Dipolos de Alto Campo

Foi concluído o projeto de uma fonte de 500 A que poderá alimentar os eletroímãs dipolares atuais do anel de armazenamento, elevando a energia

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

do feixe de elétrons para 1,6 GeV. Os componentes para uma fonte capaz de alimentar um dipolo foram comprados e prevemos que a montagem para testes esteja pronta até o início do próximo ano.

Nova rede de controle

Foi instalada para testes em junho uma nova rede de comunicação serial para os controladores locais dos equipamentos que compõe a fonte de luz síncrotron. A nova topologia mostrou-se mais confiável e insensível a variações de temperatura ambiente que o modelo antigo e novas redes foram instaladas definitivamente na parada de novembro.

Diagnóstico de Feixe

Foi implementado o modo de operação *single-bunch* com a construção de um eliminador de pacotes indesejados e um medidor de corrente por pacote. O sistema foi utilizado de forma rotineira durante o mês de março. Foram também produzidos módulos eletrônicos de disparo síncrono com a RF do anel para a instrumentação das linhas de luz, necessários para os experimentos em modo *single-bunch*.

Foram especificados e encomendados monitores de posição e perfil do feixe de luz utilizando raios X. Uma nova linha de luz de diagnóstico foi esquematizada e o projeto detalhado foi iniciado. A linha contará, além de detetores de posição comerciais, com detetores desenvolvidos localmente que poderão ser posteriormente utilizados nas linhas e luz como parte de um sistema de realimentação.

4.2 - Dispositivos de Inserção

Ao longo de 2003, acompanhamos a construção por fornecedor externo (*STI Optronics, Bellevue, EUA*) de um *wiggler* multipolar híbrido de 2,0 T que fornecerá a luz síncrotron para uma nova linha de luz de

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

cristalografia de proteínas. Uma equipe do LNLs foi até *Seattle* em novembro para verificar *in loco* a satisfação dos requerimentos do projeto deste dispositivo. Testes extensos (figura 3) e o treinamento da equipe do laboratório na operação do *wiggler* foram feitos nesta visita técnica de uma semana. A construção seguiu dentro do previsto e o mesmo foi entregue no porto de Santos em 20 de dezembro. No início de 2004 iniciamos a montagem para testes do *wiggler* no anel de armazenamento do LNLs antes de sua instalação, programada para ocorrer a partir de outubro de 2004.

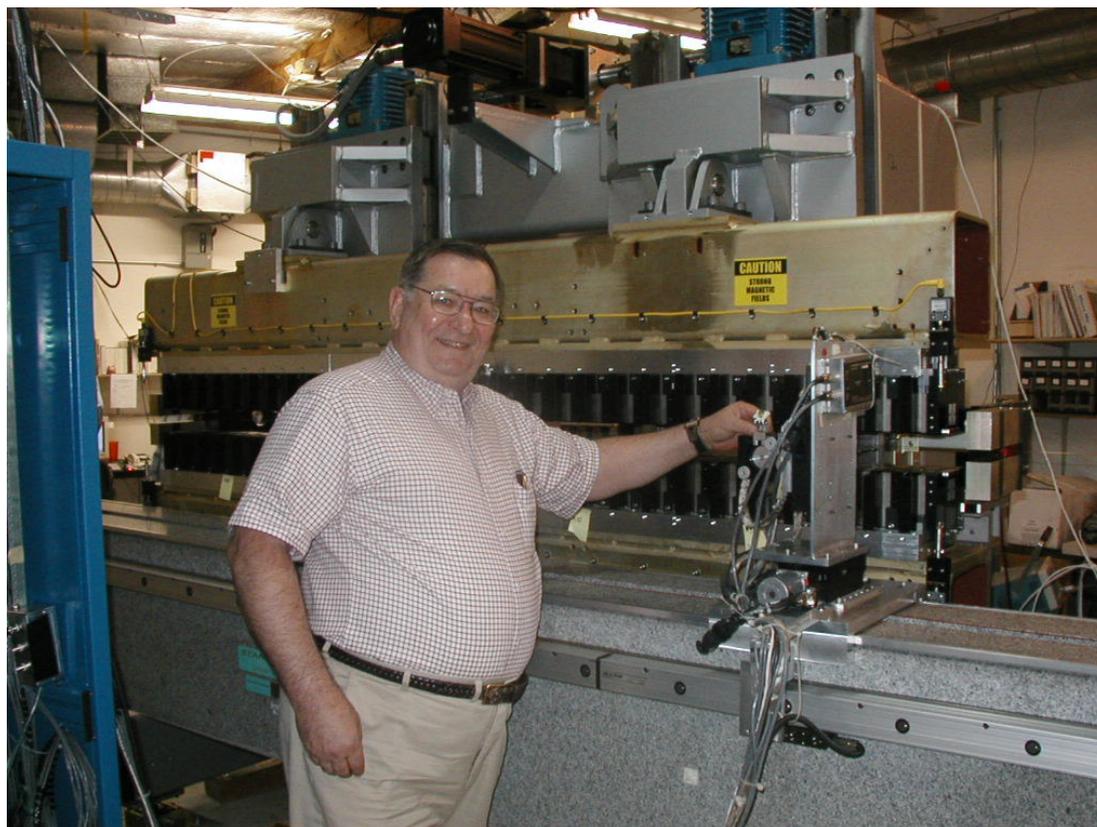


Figura 03: Dispositivo wiggler multipolar híbrido de 2 T em testes na sede da STI Optronics, durante visita técnica em novembro de 2003.

Foram construídos também os primeiros protótipos da câmara de vácuo do *wiggler* que, por razões de custo, decidimos desenvolver no LNLs. Projetamos ainda o suporte desta câmara e acertamos os detalhes de uma colaboração com o laboratório ESRF em *Grenoble* para realização do serviço de deposição de uma película adsorvedora de gases (NEG – *getter* não evaporável) que proverá o bombeamento de vácuo nesta câmara longa e de

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

baixa condutância. O primeiro protótipo foi concluído e enviado para deposição no início de outubro. Até esta data, ainda não pode ser depositado por motivos operacionais do ESRF.



Figura 04 : Protótipo da câmara do wiggler de três metros de comprimento sendo preparada para seu envio ao ESRF.

Além do dispositivo *wiggler* adquirido com recursos FAPESP junto a um fornecedor externo, o LNLS está também desenvolvendo e construindo em suas próprias oficinas um dispositivo ondulador elíptico que será capaz de produzir radiação síncrotron de alto brilho na faixa do ultra-violeta, com completo controle de polarização. No ano de 2003, detalhamos a mecânica do dispositivo ondulador com magnetos permanentes, especificamos componentes (guias lineares, fusos, *encoders*, motores, *drivers*, etc.) e efetuamos as compras. O aço para a estrutura do ondulador foi entregue em dezembro de 2003 e outros componentes e materiais necessários à confecção do protótipo do ondulador devem ser entregues até o final de Janeiro de 2004. Fizemos ainda testes do processo de montagem dos blocos

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

e testes de processos de recobrimento dos mesmos para proteção contra corrosão.

Prosseguiram ainda os trabalhos de construção de uma bancada de testes e caracterização magnética para dispositivos de inserção. Tanto medidas com pontas *hall* como medidas com bobinas girantes estão disponíveis e a repetibilidade da bancada foi testada com magnetos simples e com medidas de campo ambiente. Os primeiros testes com o novo *wiggler* estão previstos para o início do próximo ano. Esta bancada será usada tanto para verificação das medidas do *wiggler* multipolar como para caracterizar e fazer ajustes finos no dispositivo ondulador em construção no LNLS.



Figura 5: Bancada de Caracterização de dispositivos de inserção construída no LNLS. Vemos uma bobina girante de 4.2 m de comprimento e um conjunto de sensores hall para mapeamento do campo.

5. Transferência de Tecnologia

Durante o ano de 2003 foram realizadas diversas interações com a indústria e outros institutos de pesquisa. As interações em destaque no Relatório de Gestão referem-se a desenvolvimento de projetos com conteúdo tecnológico relevante. Entre os projetos destaca-se a parceria com o Laboratório *Société Synchrotron Soleil* da França, por meio de acordo de colaboração técnico-científico, para desenvolvimento, fabricação, montagem e ensaios de caracterização em sistemas de radiofrequência, utilizando uma concepção inovadora a partir de componentes de estado sólido. Este trabalho visa a fabricação de módulos de potência que poderão substituir as válvulas *Klystron*, geradoras de microondas, essenciais para o funcionamento dos aceleradores de partículas. O LNLs está concorrendo para a fabricação de um segundo lote de componentes, em escala muito maior, resultado do excelente desempenho das peças do lote inicial.

GETEC: Foi dado prosseguimento ao desenvolvimento do Projeto de Cooperação Científica com a Indústria Guanabara Química Industrial SA - GETEC. A primeira etapa do projeto de colaboração GETEC-LNLs consistiu na caracterização do catalisador *Ni-Raney* em diferentes estágios de atividade catalítica. Para tanto, foram realizadas medidas de Espectroscopia de Absorção de Raios-X (XAS), Difração de Raios-X (XRD), Fluorescência de Raios-X (XRF) e Microscopia Eletrônica de Varredura (SEM). Devido à alta reatividade e atividade pirofórica deste material, condições apropriadas de acondicionamento de amostra foram desenvolvidos para cada técnica de caracterização. Os resultados obtidos foram apresentados na *XII Conference X-ray Absorption Fine Structure* (22-27 de junho, Malmo, Suécia) e apresentam dados inovadores, uma vez que contradizem o atual mecanismo proposto para o fenômeno da perda de atividade catalítica deste material.

A segunda etapa deste estudo, envolve a elaboração de melhorias no processo de obtenção do catalisador. Esta etapa está em fase inicial, onde estão sendo construídos os equipamentos necessários para a reprodução das

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

condições de produção do catalisador, como forno, reator de digestão e hidrogenação.

HP: Neste primeiro semestre teve início a segunda etapa do convênio HP-Brasil - ABTLuS. O objetivo geral deste convênio é estudar a viabilidade do uso dos chamados "pontos quânticos semicondutores auto-formados", como implementações de "*bits-quânticos*" para processamento e armazenamento de informação quântica. Na primeira etapa deste projeto, durante o segundo semestre de 2002, foram projetadas uma fonte de evaporação para a construção (crescimento) dos pontos quânticos e feitos estudos teóricos na cinética de crescimento dos "pontos quânticos", no mapeamento das principais características químicas e estruturais que determinam a eficiência do armazenamento da informação quântica. Neste semestre, com a participação de um aluno de iniciação científica, foi projetada e testada uma cavidade eletromagnética ressonante onde os pontos quânticos estarão inseridos para a manipulação e leitura de informação quântica - uma das peças fundamentais do "*hardware* de computação quântica". Além disso foi dado prosseguimento aos estudos teóricos, com enfoque na dinâmica dos "*bits-quânticos*" na cavidade ressonante.

Outros: Ainda no desenvolvimento de projetos foi iniciado estudos com a Empresa Produtos de Alto Desafio Tecnológico de Campinas – Padtec para elaboração e desenvolvimento de metalização sobre cerâmicas para aplicação em telecomunicações.

O Laboratório de Microfabricação tem também desenvolvido projetos em conjunto com indústrias de base tecnológica, atuando na área de telecomunicações (sensores de campo magnético para telefonia celular), microeletrônica (blocos e montagens para componentes) e mecânica (sensores de pressão).

6. Informação, Educação e Divulgação

6.1. Informação Científica e Administrativa

Biblioteca

Em 2003 iniciou-se um processo de migração do acervo da Biblioteca do LNLS para um novo sistema de controle, com recursos de consulta e empréstimo *on-line*, integrados ao sistema de gestão da área administrativa.

Outro fato relevante neste ano foi a realização do acordo entre o MCT e a CAPES que disponibilizou o Portal de periódicos da CAPES para as unidades de Pesquisa do MCT, beneficiando também o LNLS. No entanto, o acesso ao Portal da CAPES ainda é precário com uma taxa de sucesso muito abaixo da necessidade dos usuários e pesquisadores. Estão sendo tomadas providências junto à CAPES para a correção deste serviço que é de fundamental importância para o bom andamento dos projetos de pesquisa realizados no LNLS. Os serviços oferecidos pela biblioteca prosseguiram regularmente.

Informática e Internet

No ano de 2003 entrou em operação a nova versão da página na *web* do LNLS, com melhor *design* e maior organização de informações relevantes para usuários, pesquisadores e para o público em geral. Além de ser multi-idioma (inglês e português) a nova página é baseada em um sistema dinâmico de banco de dados que permite maior agilidade e transparência nas atualizações da mesma. Para os usuários e colaboradores da *SmoIBNet* (*Structural Biology Molecular Network*) também foi implementada uma nova página na *web* com informações sobre os grupos de pesquisa, acesso multi-usuário ao banco de dados e espaço para agenda e fórum de discussão.

Para otimizar o recebimento de propostas de pesquisa por meio da página do LNLS, foram desenvolvidos sistemas para gerenciamento e

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

controle das etapas que vão desde a submissão e avaliação de projetos até a realização e obtenção de resultados. Neste último criou-se um sistema *on-line* de recebimento e pré-processamento de artigos para o livro anual do *Activity Report*, que permitiu agilizar em muito a editoração do livro. Além disso, foram criados sistemas *on-line* para o agendamento das instalações do Laboratório de Microscopia Eletrônica e do CeBiME (Centro de Biologia Molecular Estrutural). A organização de eventos sediados no Laboratório também se beneficiou este ano de um novo sistema *on-line* para inscrições e envio de resumos aos participantes.

Na área de segurança da rede de informática do LNLS, foram implementadas várias medidas no segundo semestre de 2003 que vão desde o uso de certificados digitais até a instalação de um sistema para detecção de intrusão indevida na rede de dados (*IDs - Intrusion Detect System*). A infraestrutura da rede, tanto para o acesso interno quanto o externo, também passou por várias melhorias neste período.

Prosseguindo com uma estratégia de se ampliar a adoção de *software* de domínio público no LNLS, foram instalados um novo sistema de gerenciamento da rede, baseado em *software* livre, e um novo sistema de correio eletrônico, com recursos de certificação digital, sistema anti-vírus e filtro para mensagens não solicitadas (*spam*). Além disso, as funcionalidades do sistema *Spy*, criado no LNLS, foram ampliadas para melhor inibir o uso de *softwares* ilegais.

6.2. Educação e Produção Científica

Com relação à produção técnico científica, foram registrados no banco de dados 137 artigos publicados em periódicos indexados pelo *Institute For Scientific Information/Thomson Scientific - ISI* provenientes do uso das instalações do LNLS, sendo agrupadas da seguinte forma:

- Interna: Pesquisa liderada por pesquisador do LNLS e pesquisadores associados, mesmo contando com a participação de pesquisadores externos;
- Externa: Pesquisa realizada utilizando pelo menos umas das

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

instalações do LNLS liderada por pesquisadores externos, podendo ou não haver colaboração dos pesquisadores do LNLS, bem como a participação de técnicos, engenheiros, físicos, químicos e biólogos do LNLS.

Por essa perspectiva pode-se observar que no gráfico a seguir que a maior parte das publicações em periódicos indexados do período em análise 82%, são resultantes de pesquisas realizadas no LNLS liberadas por pesquisadores externos.

Do total de 137 publicações em 2003, 60 são resultantes de pesquisas internas e/ou pesquisas com a participação de pelos menos 1 pesquisador do LNLS. Destacam-se várias publicações de grande impacto, entre elas, cinco Physical Review Letters, uma Europhysics Letters e quatro Journal of Biological Chemistry.

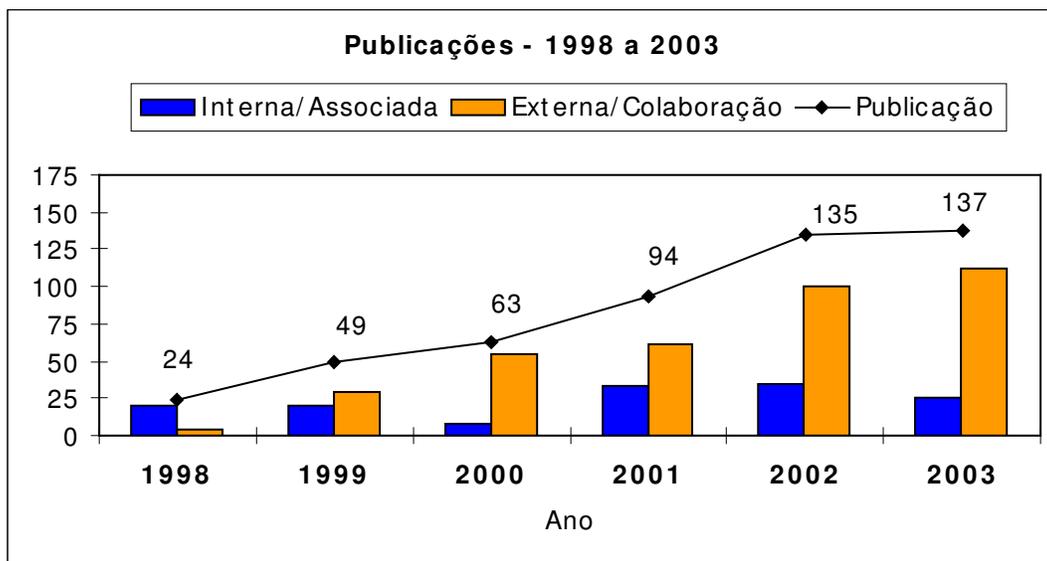


Gráfico12: Evolução das Publicações em Periódicos Indexados.

Podemos observar no gráfico 12 que o ritmo de crescimento do número de publicações diminuiu. É ainda prematuro elaborar conclusões para este resultado, sendo necessário observar a tendência nos próximos anos, necessário devido ao tempo de maturação de um programa de pesquisa. Temos que ter em mente, também, as dificuldades de buscarmos

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

um valor confiável para o número de publicações, uma vez que ela depende principalmente da informação fornecida pelos próprios pesquisadores.

A Tabela 11 relaciona os pesquisadores da ABTLuS em atividade durante o primeiro semestre de 2003.

Qtd.	Nome	Observações
1	Alberto Spisni	
2	Aline Yvette Ramos	
3	Antonio José Ramirez Londono	Início: Nov/2003
4	Antonio Rubens Brito de Castro	Associado/Unicamp
5	Arnaldo Naves de Brito	
6	Beatriz Gomes Guimarães	
7	Carlos Henrique I. Ramos	
8	Celso Eduardo Benedetti	
9	Daniel Mário Ugarte	
10	Daniela Zanchet N. Cruz	
11	Eduardo Granado Monteiro da Silva	
12	Francisco Javier Medrano	
13	Gilberto Medeiros Ribeiro	
14	Harry Westahl Junior	
15	Hélio César Nogueira Tolentino	
16	Igor Polikarpov	Associado/USP-SC
17	Iris Concepcion Linares de Torriani	Associado/Unicamp
18	João Alexandre Ribeiro G. Barbosa	
19	Jörg Kobarg	
20	José Antônio Brum	
21	Nilson Ivo Tonin Zanchin	
22	Pedro Fernandes Tavares	
23	Richard Landers	Associado/Unicamp
24	Rogério Magalhães Paniago	Associado/UFGM
25	Sérgio Teixeira Ferreira	Associado/UFRJ
26	Stefan W. Kycia	Término: Ago/2003

Tabela 11 : Pesquisadores da ABTLuS.

Cumprе esclarecer que, para fins de acompanhamento dos indicadores de desempenho pactuados no Contrato de Gestão, serão considerados um total de 23 pesquisadores (os pesquisadores associados são considerados na regra de ½ pesquisador).

Em 2003, um total de 84 alunos estiveram sob a orientação dos pesquisadores da ABTLuS, sendo 28 alunos de iniciação científica, 12 projetos de bolsas técnicas, 44 alunos de pós-graduação, mantendo uma taxa de aproximadamente 2 pós-graduandos por pesquisador. Foram

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

supervisionados 20 pós-doutores durante o período, aproximadamente 1 por pesquisador.

A Tabela 12 relaciona os alunos de pós-graduação sob orientação durante o ano de 2003.

Quant.	Pós-Graduandos	Nível	Observação
1	Alexandre Jose Christino Quaresma	Doutorado	
2	Amanda Abdalla Valerio	Doutorado	
3	Ana Olivia Tiroli	Doutorado	
4	Anita Paula Testa Salmazo	Mestrado	
5	Beatriz Santos Capela Alves	Doutorado	Início: Abr/2003
6	Celisa Caldana Costa	Mestrado	
7	Cinthia Piamonteze	Doutorado	
8	Cristiano Luis Pinto De Oliveira	Doutorado	
9	Dario Oliveira Dos Passos	Doutorado	
10	Denise Basso Nakabayashi	Doutorado	
11	Edmilson Rui	Doutorado	
12	Euripedes De Almeida Ribeiro Junior	Doutorado	
13	Fabio Cupri Rinaldi	Mestrado	
14	Felix Guillermo Gonzalez Hernandez	Mestrado	
15	Flavia Cristina Nery	Doutorado	
16	Flavia Raquel Gonçalves Carneiro	Doutorado	
17	Jose Marcelo Vargas	Doutorado	
18	Julio Cesar Borges	Doutorado	
19	Julio Criginski Cezar	Doutorado	Término: Out/2003
20	Karen Cristiane M. De Moraes	Doutorado	Término: Jan/2003
21	Kelly Santos	Doutorado	
22	Leonardo Fernandes Fraceto	Doutorado	
23	Leticia Khater	Doutorado	
24	Lucia Helena Coutinho	Doutorado	
25	Marcela Hernandez Jimenez	Mestrado	
26	Marcelo Jun Murai	Doutorado	
27	Marina Marques Araujo Teixeira	Doutorado	Início: Mai/2003
28	Maya Paola Cerro Vergara	Mestrado	
29	Narcizo Marques De Souza Neto	Mestrado	
30	Natalia Prado De Abreu	Doutorado	
31	Odalys Garcia Cabrera	Doutorado	Início: Ago/2003
32	Patricia Pereira Coltri	Doutorado	Início: Ago/2003
33	Patricia Ribeiro De Moura	Doutorado	
34	Raimundo Lora Serrano	Doutorado	
35	Raquel Aparecida De Souza	Mestrado	
36	Ricardo Dos Reis Teixeira Marinho	Doutorado	Término: Jul/2003
37	Ronaldo Alves Pinto Nagem	Doutorado	
38	Rosicler Lazaro Barbosa	Doutorado	
39	Sandra Mara Naressi Scapin	Doutorado	
40	Sebastian Klinke	Doutorado	Término: Jul/2003
41	Taila Andrade Lemos	Doutorado	Término: Jul/2003
42	Thiago Carlos Cagliari	Doutorado	
43	Tulio Costa Rizutti Da Rocha	Doutorado	
44	William Cesar Bento Regis	Doutorado	

Tabela 12: Alunos de pós-graduação sob orientação.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

A Tabela 13 relaciona os pós-doutores sob supervisão durante o ano de 2003.

Quant.	Pós-Doutores	Observações
1	Ariel Gomez Gonzalez	Término: Jan/2003
2	Caroline Ribeiro de Borja Oliveira	
3	Eliana Guedes Stehling	
4	Eliana Maria Assmann	Início: Out/2003
5	Evaldo Ribeiro	
6	Henrique Ferreira	Início: Out/2003
7	Gustavo de Medeiros Azevedo	
8	Juan Carlos Gonzalez Perez	
9	Leide Passos Cavalcanti	Término: Abr/2003
10	Ljubica Tasic	
11	Manoel Gustavo Petrucelli Homem	Início: Fev/2003
12	Marcelo José Surpili	Término: Set/2003
13	Maria Cristina Cabral Garcia	Término: Out/2003
14	Maurício Luis Sforça	
15	Sergio Oyama Junior	
16	Silvana Navarro Cassu	Término: Abr/2003
17	Thelma de Aguiar Pertinhez	
18	Tulio Marcos Santos	
19	Varlei Rodrigues	Término: Mar/2003
20	Wladimir Hernandez Flores	Término: Jul/2003

Tabela 13: Pós-doutores sob supervisão.

O número de pós-doutores continua abaixo do desejado. Vale ressaltar que este é um cenário característico em diversas instituições com um quadro de pesquisadores predominantemente jovem. Uma das possíveis explicações é que há hoje uma forte tendência, observada em quase todas as universidades, de que os pós-graduandos permaneçam nas instituições onde obtiveram seu doutorado para fazer o pós-doutoramento. Esta é uma atitude que prejudica tanto a formação de novos pesquisadores, pela perda de diversidade na sua formação, quanto instituições em geral, devido a perda de dinamismo na troca de conhecimentos. Em geral, esta situação tem sido aceita pelas instituições de fomento.

Em 2003 foram realizados 7 cursos e 1 mini-curso detalhados na Tabela 14. A baixa oferta de cursos neste ano deve-se principalmente a dois fatores: 1) não foi realizado nenhuma Oficina da Rede de Nano por considerar-se concluída esta etapa; 2) apenas dois cursos da Rede Nacional

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

de Biologia Molecular Estrutural foram realizados devido às restrições orçamentárias impostas pelo Ministério de Ciência e Tecnologia - MCT para esta atividade.

Título	Palestrantes/ Organizador	Período	Participantes
Mini-curso de “Estabilidade de proteínas: Teoria e Prática”	Carlos Ramos	02 a 06 de Junho	22
Curso de Cristalização	Francisco Javier Medrano Martins	10 a 12 de Junho	20
IV Escola de Inverno em Sistemas Nanoestruturados	Daniela Zanchet, Noemia Watanabe, Cylon G. Silva, Pedro Tavares, Stefan Kycia, Gilberto Medeiros-Ribeiro, Daniel Ugarte, Juan Carlos G. Perez, Harry Westfahl e Evaldo Ribeiro	21 a 23 de Julho	30
Curso de Sequenciamento de Peptídeos por LC/MS/MS	Carlos Bloch	08 a 12 de Setembro	11
Curso LC/MALDI MS/MS em espectrômetro AB4700 Proteomics Analyzer (TOF - TOF)	Carlos Bloch	20 a 24 de Setembro	14
Curso Intrdutório de SAXS	Profª. Iris Torriani, Cristiano L. P. de Oliveira, Tomás S. Plivelic	03 a 05 de Novembro	27
Mini-curso de “Espectroscopia VUV”	Arnaldo N. Brito, G. Kleiman, A. R. B. de Castro, A. Siervo e R. Landers	05 a 07 de Novembro	19

Tabela 14: Cursos realizados em 2003.

No primeiro semestre de 2003, o LNLS em parceria com a UNICAMP, promoveu o curso eletivo denominado “Introdução às Técnicas Experimentais no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron” para 22 alunos de graduação dos cursos de Física, Química e Biologia da UNICAMP. O caráter multidisciplinar do curso possibilitou aos alunos compreensão básica das técnicas disponíveis no LNLS, bem como participar de experiências associadas a diferentes áreas do conhecimento.

Nesse ano foi realizado, em conjunto com o Instituto de Física da UNICAMP, a VI Oficina de Física: Física Aplicada à Biologia e Medicina, com a

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

1ª edição, realizada no dia 12 de Abril: contou com a participação de 110 integrantes; a 2ª edição, realizada no dia 24 de maio: teve 80 participantes. Essas oficinas são abertas ao público em geral mas voltadas principalmente a professores do ensino médio, com o objetivo de atualizá-los quanto à pesquisa que se desenvolve nas universidades e centros de pesquisa.

A VI Oficina, organizada em conjunto pelo IFGW-UNICAMP e LNLS e consistiu de palestras (parte da manhã na UNICAMP e parte da tarde no LNLS) e visitas aos laboratórios do LNLS.

6.3. Divulgação

Os maiores destaques na área de divulgação neste ano foram a produção do *folder* "Oportunidades no LNLS", em português e inglês, com 10 mil exemplares, a publicação da 7ª edição da *Newsletter*, a realização da XIII Reunião Anual de Usuários, nos dias 17 e 18 de fevereiro que contou com a participação de 303 usuários e a nova edição do *Activity Report*. Há, claramente, necessidade de redinamizar este setor. O LNLS deve ter uma diversidade maior de material de divulgação bem como garantir a regularidade e periodicidade das publicações. Esta situação está sendo estudada buscando uma solução dentro das condições do laboratório.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2003

7. Gestão e Planejamento

As responsabilidades de prestação de contas previstas no Contrato de Gestão foram atendidas pela ABTLuS. As demonstrações financeiras relativas ao ano de 2002 foram publicadas no Diário Oficial da União e no Jornal da Ciência, assim como o parecer dos auditores independentes. A Secretaria Federal de Controle Interno concluiu em junho de 2003 os trabalhos de auditoria atestando a regularidade das contas da Associação. O relatório de gestão de 2002 está disponível na página do LNLS.

Foram realizados 103 seminários, sendo 35 por pesquisadores estrangeiros e 68 por pesquisadores brasileiros e estiveram no LNLS 847 visitantes, oriundos de colégios, universidades, eventos científicos e autoridades.

7.1 – Relatório Financeiro

Foram assinados três Termos Aditivos (8º, 9º e 10º) para compor o Orçamento da ABTLuS em 2003, totalizando o montante de R\$ 16,9 milhões, aproximadamente 9% inferior aos valores previstos na Lei Orçamentária para o exercício vigente. A evolução do orçamento da ABTLuS pode ser observado no Gráfico 13.

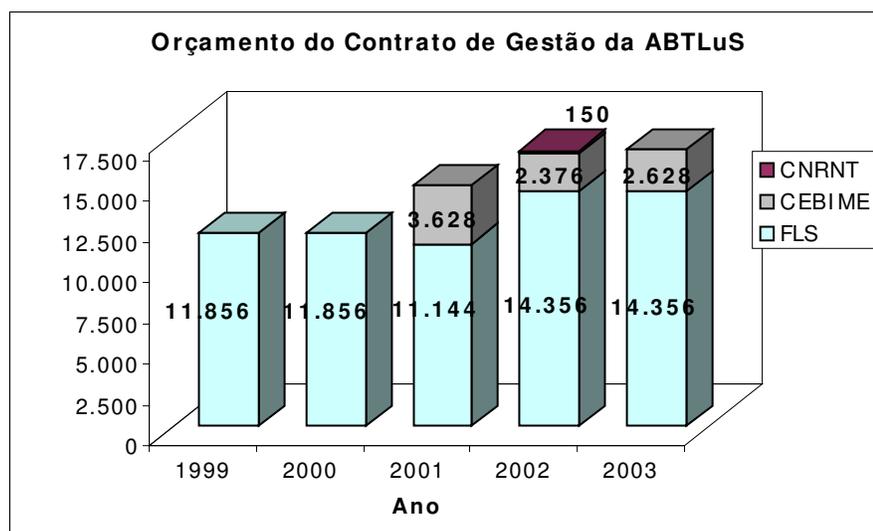


Gráfico 13: Orçamento do Contrato de Gestão ABTLuS. R\$ 855 mil, referentes a FLS, não foram executados, ficando para serem repassados em 2004 como “restos a pagar”.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

O fluxo de repasses dos recursos do Contrato de Gestão foram irregulares no período, como pode-se verificar no Gráfico 14, e não foram cumpridos em sua totalidade.

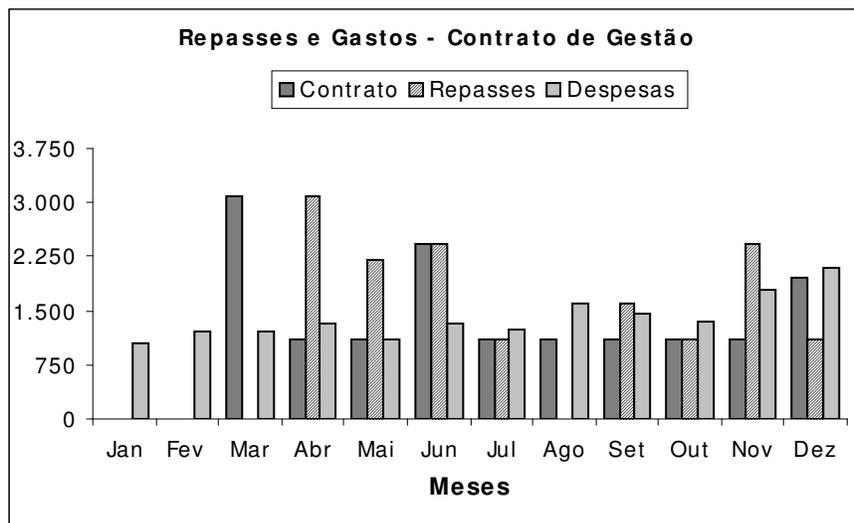


Gráfico 14: Repasses e gastos do período de janeiro a dezembro de 2003.

No início de janeiro de 2004 foram repassados R\$ 1,1 milhão relativos ao orçamento de 2003 e ainda estão em restos a pagar R\$ 855 mil. A irregularidade dos repasses prejudica sensivelmente o planejamento, a implementação e manutenção de programas críticos do LNLS, com reflexos nem sempre imediatos no nível de competitividade tecnológica exigido pelas atividades essenciais. Nessa perspectiva optou-se por utilizar parte das reservas constituídas e preservar as atividades de atendimento aos usuários e priorizar investimentos críticos.

As fontes de receitas e os gastos da ABTLuS, durante o ano de 2003, podem ser observadas na Tabela 15.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Receitas e Despesas - ABTLuS	2003	%
Receitas	R\$ 27,490	100%
Contrato de Gestão	R\$ 15,028	55%
Fonte de Luz Síncrotron	R\$ 12,400	
Biologia Molecular Estrutural	R\$ 2,628	
Centro Nacional de Nanotecnologia	R\$ -	
Outras Fontes	R\$ 12,461	45%
Vendas, receitas financeiras e outras	R\$ 2,680	
Pessoal CNPq e Bolsas	R\$ 1,932	
Agências de Fomento	R\$ 7,849	
Despesas	R\$ 29,724	100%
Despesas Correntes	R\$ 17,912	60%
Pessoal	R\$ 11,396	
ABTLuS	R\$ 9,464	
Pessoal CNPq e Bolsas	R\$ 1,932	
Materiais e serviços	R\$ 9,172	
Equipamentos fabricados no LNLS ^a	R\$ (2,656)	
Investimentos	R\$ 11,812	40%
Edificações e equipamentos	R\$ 3,963	
Agências de Fomento	R\$ 7,849	
Resultado do período	R\$ (2,235)	

Tabela 15: Recursos Totais ABTLuS.

Cumpra observar que os recursos provenientes das Agências de Fomento não referem-se à doação do equipamento à ABTLuS ou sua incorporação ao patrimônio da mesma. Aqui refere-se à entrada do equipamento na ABTLuS. Em particular no ano de 2003, o Centro de Biologia Molecular Estrutural recebeu auxílio FAPESP na ordem de aproximadamente 4 milhões de reais relativo aos espectrômetros de massa. Além do forte apoio da FAPESP, o laboratório contou com um significativo aporte financeiro dentro dos projetos CT-Infra I e CT-Infra III, aprovados e contratados em 2001 e 2002, respectivamente. Estes recursos, de aproximadamente R\$ 1,8 milhões, garantiram um nível importante de investimento ao longo do ano de 2003.

A alavancagem de recursos do contrato de gestão, durante o ano de 2003 foi de 83% conforme descrito no indicador de desempenho. Os gastos

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

totais com pessoal durante o período totalizaram R\$ 11.396 milhões, ou seja, 41% dos recursos totais do período. O perfil do quadro funcional do LNLS pode ser observado no gráfico a seguir:

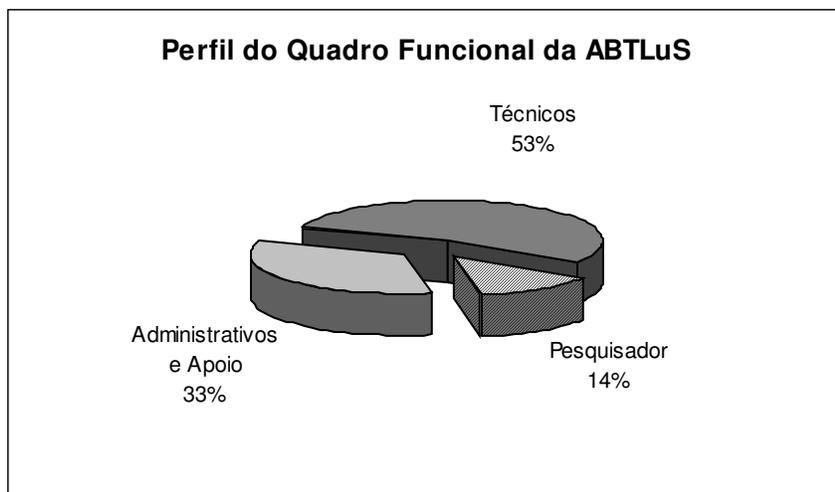


Gráfico 15: Perfil do Quadro Funcional da ABTLuS

O balanço patrimonial, a demonstração do superávit da ABTLuS, o parecer dos auditores independentes, a demonstração das origens e aplicações de recursos, a demonstração do fluxo de caixas e as notas explicativas constam no Apêndice E.5 desse relatório.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

C. INDICADORES DE DESEMPENHO

Macro - Objetivo	Indicador	Unid.	Tipo	Peso	Realizado 2003	Pactuado 2003
Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.	1. Número de horas - linhas	U	D	2	40.533	33.000
	2. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)	%	D	3	98%	93%
	3. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron	%	D	3	99%	90%
	4. Custo da hora - linha	R\$	D	2	R\$ 245	< R\$ 300
	5. Custo da hora - microscópio	R\$	D	2	R\$ 480	< R\$550
	6. Número de projetos realizados	U	Uso	3	456	300
	7. Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron	%	Uso	2	72%	60%
	8. Índice de satisfação dos usuários	%	D/Uso	2	95%	85%
	9. Número total de publicações	U	Uso	3	137	100
Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo.	10. Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS	%	D	2	2,6	2,5
	11. Taxa de orientação de pós - graduados	%	D	2	1,9	1,5
	12. Taxa de supervisão de pós - doutores	%	D	3	0,9	1,0
	13. Número de notas técnicas disponibilizadas na Internet	U	D	2	5	10
Implantar e gerir a infra - estrutura da ABTLuS visando ganhos de eficiência e eficácia mediante novos mecanismos de gestão e informação e difusão de Ciência, Tecnologia e Inovação.	14. Número de estudos e projetos externos	U	D	2	4	5
	15. Número de técnicos externos treinados	U	D	2	23	25
	16. Número de pesquisadores internos treinados	U	D	3	143	250
	17. Horas de treinamento por funcionário	U	D	1	25	17
	18. Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão	%	D	1	83%	30%

Legenda

Tipo: Uso; D= Desempenho np: não pactuado nd: não disponível

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

As análises dos resultados apresentados no quadro de indicadores realizados no ano de 2003, estão descritas a seguir:

1 – Números de horas linhas

Previsto: 33.000 horas linhas

Realizado: 40.533 horas linhas

Grau de alcance: Meta atingida

Em 2003 foram fornecidas 3.995 horas de feixe para usuários de luz síncrotron em 11 linhas de luz. Esse número de horas fornecidas só foi possível devido a operação em regime contínuo (24 horas por dia, de segunda-feira à sexta-feira), ocorrida em função da demanda de usuários para a operação da fonte de luz síncrotron.

Excepcionalmente, no mês de março de 2003, a fonte de luz síncrotron operou em dois modo de operação, o modo ‘*Multi Bunch*’ e o modo especial o ‘*Single Bunch*’, de interesse para experimentos com resolução temporal. No novo modo de operação apenas 3 linhas de luz (SXS, TGM e SGM) puderam operar.

A composição da quantidade de horas fornecidas no período foi a seguinte:

Período	Horas em Operação	Linhas em Operação	Total de Horas Disponíveis
Janeiro	398	10	3.980
Fevereiro	339	10	3.390
Março	187	10	1.870
Abril	452	10	4.520
Mai	392	10	3.920
Junho	124	10	1.240
Julho	497	11	5.467
Agosto	441	11	4.851
Setembro	472	11	5.192
Outubro	503	11	5.533
Novembro	0	0	0
Dezembro	0	0	0
Horas no Modo Multi Bunch			39.963
Março	190	3	570
Horas no Modo Single Bunch			570
Total de Horas Disponíveis			40.533

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

A meta pactuada para o ano foi superada.

2. Confiabilidade (horas entregues/ horas previstas)

Previsto: 93%

Realizado: 98%

Grau de alcance: Meta atingida

Durante o ano de 2003 foram fornecidas 3.995 horas de feixe para usuários de luz síncrotron, sendo 3.869 horas durante o horário programado (horas entregues) e 126 horas em turnos extraordinários. Foram programadas 3.949 horas para este período.

O resultado obtido desse indicador foi acima do pactuado. Este excelente resultado do indicador confirma a possibilidade de operar a máquina em regime de operação contínua.

Fórmula:

[horas entregues no tempo programado/horas previstas]

3 – Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron

Previsto: 90%

Realizado: 99,3%

Grau de alcance: Meta atingida

O índice de desempenho da fonte de luz síncrotron é diretamente relacionado à rapidez com que experimentos podem ser conduzidos nas linhas de luz. Este indicador procura medir a intensidade da fonte em relação a um padrão pré-definido e trazer para o quadro de indicadores o resultado do esforço e investimento necessário para manter a fonte de luz operando conforme esperado pelos usuários.

O índice de desempenho é dado pela média ponderada de três parâmetros operacionais: a corrente entregue no início de cada turno de usuários, a corrente média nos turnos e o tempo de vida médio do feixe. Para cada um

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

destes parâmetros é estabelecido um valor de referência e o índice de desempenho é determinado como um percentual de realização desta referência, com os devidos pesos.

A Fórmula de cálculo para o Desempenho (D) é:

$$D = \frac{I_i}{I_{i0}} \alpha + \frac{\tau}{\tau_0} \beta \frac{I_{av}}{I_{av0}} \gamma$$

onde I_i é a corrente média no início dos turnos de usuários, τ é o tempo de vida médio em turnos de usuários e I_{av} é a corrente média ao longo dos turnos de usuários. Os parâmetros I_{i0} , τ_0 , I_{av0} são valores de referência e α , β e γ são os respectivos pesos. Os valores numéricos são:

$$I_{i0} = 250\text{mA}$$

$$\tau_0 = 10\text{horas}$$

$$I_{av0} = 163\text{mA}$$

e os pesos são:

$$\alpha = 3$$

$$\beta = 1$$

$$\gamma = 5$$

Fórmula:

{ [(Corrente Inicial Média/Corrente Inicial Média Nominal)* 3] + [(Tempo de Vida Médio/Tempo de Vida Médio Nominal)* 1] + [(Corrente Média/Corrente Média Nominal)* 5] / (3+ 1+ 5)

Memória de Cálculo:

Parâmetro Operacional	Desempenho	Valor Nominal	Peso
Corrente Inicial Média	250 mA	250	3
Corrente Média	155 mA	163	5
Tempo de Vida Médio	12 h	10	1

Ind. 3 = { [(250/ 250)* 3] + [(155/ 163)* 5] + [(12/ 10)* 1] } / 3+ 1+ 5 = 99%

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

A meta pactuada foi superada, demonstrando o alto o nível de desempenho com que a fonte de luz operou em 2003.

4 – Custo hora-linha

Previsto: < R\$ 300 hora linha

Realizado: R\$ 245 hora linha

Grau de alcance: Meta atingida

A fórmula de cálculo do custo hora-linha foi revista para o quadro de indicadores de 2003 com a Comissão de Avaliação e Acompanhamento do Contrato de Gestão e foram considerados os gastos de manutenção da infraestrutura de pesquisa com luz síncrotron (energia elétrica, pessoal, etc), excluídos os investimentos.

Fórmula:

Soma dos gastos diretos relacionados a manutenção e melhoramentos da fonte de luz síncrotron e linhas de luz (programas 1 e 4) com a adição de 60% dos gastos comuns relacionados aos demais programas de infraestrutura dividido pelo total de horas linha de luz (indicador 1).

Memória de Cálculo:

Descrição	Valores em R\$
Gastos com manutenção e melhoramentos dos programas 1 e 4	R\$ 5.777.430
60% dos gastos com demais programas de infraestrutura comum	R\$ 4.143.335
Total dos gastos	R\$ 9.920.765
Número de horas-linhas no ano	40.533 h
Custo Hora linha no ano	R\$ 244,76h

$$\text{Ind. 4} = [\text{R\$}5.777.430 + (\text{R\$}6.905.559 * 60\%)] / (40.533) = \text{R\$} 245,00$$

O custo hora linha de luz foi alcançado em virtude da elevação da quantidade de horas linhas disponibilizadas aos Usuários com os turnos estendidos.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

5 – Custo hora-microscópio

Previsto: < R\$ 550 hora microscopia

Realizado: R\$ 480 hora microscopia

Grau de alcance: Meta atingida

Da mesma forma que no custo hora-linha, a fórmula de cálculo do custo hora-microscópio foi revista, com a Comissão de Avaliação e Acompanhamento do Contrato de Gestão, para o quadro de indicadores de 2002, e foram considerados os gastos com manutenção da infra-estrutura de pesquisa com os microscópios (contrato de manutenção dos microscópios, energia elétrica, pessoal, etc) e excluídos os investimentos.

Fórmula:

Soma dos gastos diretos relacionados a manutenção e melhoramentos de micro e nano tecnologia (programa 2) com a adição de 15% dos gastos comuns relacionados aos demais programas de infra-estrutura dividido pelo total de horas de microscópios.

Memória de Cálculo:

Descrição	Valores em R\$
Gastos com manutenção e melhoramentos do programa 2	R\$ 1.009.456
15% dos gastos com demais programas de infra-estrutura comum	R\$ 1.035.834
Total dos gastos	R\$ 2.045.290
Horas de microscópios	
- LV	1547 h
- TEM	2157 h
- FEG	561 h
Total de horas de microscópios	4265 h
Custo hora-microscópios	R\$ 479,55

Ind. 5 = [R\$ 1.009.456 + (R\$ 6.905.559 * 15%)] / (1547 + 2157 + 561) = R\$ 480,00

O aumento das horas disponibilizadas aos Usuários reflete diretamente no custo hora microscópio como pode ser observado no quadro acima, ou seja dentro do limite de horas possíveis de utilização, quanto maior for sua utilização menor será o custo por hora.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

6 – Números de propostas realizadas

Previsto: 300 propostas de pesquisas

Realizado: 456 propostas de pesquisas

Grau de alcance: Meta atingida

No ano de 2003 foram realizadas 358 propostas de pesquisas nas linhas de luz e 96 no Laboratório de Microscopia Eletrônica e 2 no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear. Nesse ano foram superadas as expectativas com relação a quantidade de propostas de pesquisas realizadas na FLS, o que demandou esforços do laboratório como um todo no atendimento a esses Usuários.

7 – Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron

Previsto: 60%

Realizado: 72%

Grau de alcance: Meta atingida

O indicador considera a capacidade de ampliação do tempo de operação da fonte de luz síncrotron. Do total de 8.760 horas disponíveis no período, a fonte de luz síncrotron não esteve em operação durante 2.452 horas.

Fórmula:

[Coeficiente do total de horas em uso e horas disponíveis no período]

Memorial de Cálculo:

Uso da Fonte de Luz Síncrotron	Total Horas
Usuários	3995 h
Injeção	189 h
Estudo de Máquina	1138 h
Manutenção	631 h
Comissionamento	275 h
Falhas	80 h
Total em uso	6.308 h
Horas disponíveis	8.760 h
Grau de Saturação	72%

$$\text{Ind. 7} = (3995 + 189 + 1138 + 631 + 275 + 80) / (365 \text{ d} * 24 \text{ h}) = 72\%$$

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

O aumento do índice de saturação da fonte em relação ao valor do ano de 2003 é resultado da forte demanda pelo tempo de feixe por parte dos usuários o que levou a operação de 24 horas/dia.

8 – Índice de satisfação dos usuários

Previsto: 85%

Realizado: 95%

Grau de saturação: Meta atingida

O indicador é elaborado com base no relatório do Ombudsman do LNLS e considera as seguintes variáveis: qualidade da fonte de luz síncrotron e qualidade do apoio administrativo. A partir de 2003 o relatório do Ombudsman não contempla mais as questões da “qualidade da refeição” e “do alojamento” como nos anos anteriores em que também considerávamos na apuração do índice de satisfação dos Usuários.

Fórmula:

A partir do questionário do “Ombudsman” do LNLS são destacados dois itens: “qualidade da fonte de luz síncrotron e do apoio técnico” e “qualidade do apoio administrativo (SAU)” e ponderadas as questões satisfatórias, para cada item em 70%, 30% respectivamente.

Memória de Cálculo:

1- Qualidade FLS e Apoio Técnico = Peso 70%

Itens	Qualidade FLS	Apoio Técnico	Total
Além do Esperado	10	27	37
De Acordo	68	53	121
Aquém	7	4	11
Total dos Entrevistados	85	84	169
Total (Além do Acordo)	78	80	158

Cálculo: (169 * 70%) e (158 * 70%) = 118,30 e 110,60

2 - Qualidade Apoio Administrativo = Peso 30%

Itens	Apoio Administrativo	Total
Além do Esperado	46	46
De Acordo	42	42
Aquém	0	0
Total dos Entrevistados	88	88
Total (Além do Acordo)	88	88

Cálculo: (88 * 30%) e (88 * 30%) = 26,4 e 26,4

Ind. 8 = (110,6+26,4) / (118,30+26,4) = (137,00/ 144,7)* 100 = 95%

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

9 – Números total de publicações

Previsto: 100 artigos em periódicos indexados

Realizado: 137 artigos em periódicos indexados

Grau de alcance: Meta atingida

Em 2003 foram publicados um total de 137 artigos em periódicos indexados pelo *Institute For Scientific Information/Thomson Scientific - ISI*. Esta informação tem origem no pesquisador e pode não estar completa, apesar do esforço feito durante o ano todo para captação e atualização o banco de dados de produção bibliográfica.

10 – Publicações resultantes por pesquisadores da ABTLuS

Previsto: 2,5 artigos por pesquisador interno

Realizado: 2,6 artigos por pesquisador interno

Grau de alcance: Meta atingida

Durante 2003 foram publicados 60 artigos em periódicos indexados por 23 pesquisadores internos da ABTLuS. Para efeito do cálculo do indicador, considera-se o artigo em periódicos indexados que tenha o nome do pesquisador da ABTLuS, como um dos autores. Portanto, foram publicados cerca de 2,6 artigos em periódicos indexados por pesquisador da ABTLuS.

11 – Taxa de orientação de pós-graduados

Previsto: 1,5 pós-graduado sob orientação por pesquisador interno

Realizado: 1,9 pós-graduado sob orientação por pesquisador interno

Grau de alcance: Meta atingida

Estão sendo orientados 44 alunos de pós-graduação. Uma média de quase 2 pós-graduandos por pesquisador interno da ABTLuS.

12 – Taxa de supervisão de pós-doutores

Previsto: 1 pós-doutor sob supervisão de pesquisador interno

Realizado: 0,9 pós-doutor sob supervisão de pesquisador interno

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Grau de alcance: Meta parcialmente atingida (90%)

Estão sendo supervisionados 20 pós-doutores. Em relação aos 14 pós-doutores supervisionados no primeiro semestre de 2003, conseguimos preencher mais 6 vagas existentes no segundo semestre, quantidade significativa frente a dificuldade de preencher essas vagas.

13 – Número de Notas Técnicas disponibilizadas na Internet

Previsto: 10 notas técnicas

Realizado: 5 notas técnicas

Grau de alcance: Meta não atingida

Em 2003 foram produzidas 5 (cinco) notas técnicas disponibilizadas na Internet.

Até o ano de 2003, não haviam metas pactuadas para esse indicador, sendo esta a sua primeira apresentação. Esta meta foi superestimada e deverá ser revista para 2004.

14 – Números de Estudos e Projetos

Previsto: 5 estudos ou projetos

Realizado: 4 estudos e projetos

Grau de alcance: Meta parcialmente atingida (80%)

Durante o ano de 2003 foram mantidos 2 projetos com indústria, sendo um com a GETEC Guanabara Química Industrial S.A. e outro com a *Hewlett Packard* – HP.

Também firmou – se uma parceria técnico – científico no desenvolvimento de módulos de potência com Laboratório *Societé Synchrotron Soleil* da França.

Em setembro de 2003 foi firmado um convênio de cooperação técnico – científico com a empresa Padtec S.A. para elaboração e desenvolvimento de metalização sobre cerâmicas para aplicação em telecomunicações.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

15 – Números de técnicos externos treinados

Previsto: 25 técnicos treinados

Realizado: 23 técnicos treinados

Grau de alcance: Meta parcialmente atingida (92%)

O Programa de Estágios de Ensino Médio implementado em 2002 pela ABTLuS selecionou 23 estagiários durante o ano de 2003.

16 – Número de pesquisadores externos treinados

Previsto: 250 pesquisadores

Realizado: 143 pesquisadores

Grau de alcance: Meta não atingida (57%)

No ano de 2003 foram realizados cinco cursos e dois mini-cursos, tendo sido treinados 143 pesquisadores. A realização de cursos, mini-cursos, encontros e oficinas, ficou prejudicada pois estava condicionada a viabilização dos recursos, principalmente, a da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural, o qual não foi repassado para a ABTLuS, e o da Rede Proteômica Nacional que só ocorreu, de forma significativa, no final de 2003.

17 – Horas de treinamento por funcionário

Previsto: 17 horas por funcionário

Realizado: 25 horas por funcionário

Grau de alcance: Meta atingida

Em 2003 foram realizadas horas de treinamento para uma força de trabalho de 322 pessoas. O aumento no quantidade de horas de treinamento deve-se principalmente a demanda por cursos/treinamento de longa duração ocorridos no período.

18 – Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão

Previsto: 30% de alavancagem

Realizado: 83% de alavacagem

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Grau de alcance: Meta atingida

Os recursos do Contrato de Gestão recebidos até o mês de dezembro de 2003 totalizaram R\$15.028 mil. Os recursos de agências de fomento, receitas de aplicações financeiras, vendas e outras fontes, na ordem de R\$12.461 mil. No ano de 2003 o Centro de Biologia Molecular Estrutural recebeu auxílio na ordem de quase 4 milhões em equipamentos. Este índice ficou “inflacionado” tendo em vista a não-integralização dos repasses financeiros contratados nos Termos Aditivos e também a não-contemplação do limite da Lei Orçamentária nestes Termos Aditivos.

D. CONCLUSÃO

O ano de 2003 caracterizou-se, no plano nacional, pela redefinição de algumas prioridades e programas científicos. Isto afetou várias atividades planejadas no LNLS para o ano. Em particular, o programa nacional de nanociência e nanotecnologia foi adiado, o que atrasou o maior aproveitamento do LNLS nesta área. Na área de biologia e biotecnologia, a redefinição das atividades na área proteômica atrasou os trabalhos da Rede de Proteoma. Mais importante, a Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural teve dificuldades de operar devido a não contratação pelo MCT dos recursos previstos para esta atividade. Há expectativas de retomada destas atividades a nível nacional e a participação do LNLS nestes programas a partir de 2004.

A difícil situação econômica do país, principalmente no primeiro semestre, levou a uma limitação dos valores contratados em relação ao limite da Lei Orçamentária. Embora parte deste “contingenciamento” tenha sido recuperado ao longo do ano, o repasse financeiro dos valores contratados foi irregular e não foi inteiramente realizado. Mesmo dentro deste cenário, a situação financeira foi mais estável do que a encontrada no ano de 2002. Isto permitiu a ABTLuS operar de forma regular, recuperando, inclusive, um certo nível de investimento necessário para a manutenção das instalações experimentais em níveis competitivos além de ampliar suas capacidades, retomando o planejamento que havia sido em grande parte paralisado no ano anterior.

Durante o ano de 2003 foram realizados nas diversas instalações experimentais do LNLS mais de 450 projetos de pesquisas, envolvendo aproximadamente 800 pesquisadores externos. A fonte de luz síncrotron encontra-se, hoje, com suas estações experimentais saturadas e com demanda excedente na maior parte delas. Os microscópios eletrônicos também encontram-se praticamente saturados, em particular o de transmissão eletrônica.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2003

A retomada dos investimentos permitiu concluir a construção, instalação e comissionamento da 12^a. Linha de luz (de difração para policristais) e a construção da 13^a. Linha de luz (espalhamento a baixo ângulo), em fase de instalação. Além disso, outras duas linhas de luz encontram-se em fase de construção e uma em fase de projeto.

Dentre os esforços que permitiram o desenvolvimento das novas instalações, destacamos a importância do Fundo Setorial de Infraestrutura, através dos projetos aprovados em 2001 e 2002, respectivamente o CT-Infra I e o CT-Infra III, que permitiram manter os investimentos em novas instalações ao longo de 2003, destacando-se a construção da linha de luz de difração de policristais, com recursos do CT-Infra III e o desenvolvimento, em fase final, do protótipo do ondulador, com recursos do CT-Infra I e III. Destacamos também os trabalhos de acompanhamento da construção do *wiggler*, primeiro dispositivo de inserção a ser instalado no LNLS, que permitirá a construção e instalação de uma linha de luz de cristalografia de proteínas, técnica MAD, essencial para o programa de biologia molecular estrutural, projeto apoiado pela FAPESP.

Os investimentos realizados ao longo dos anos vêm produzindo excelentes resultados, como pode se verificar pelo número e qualidade das publicações indexadas que utilizaram as instalações do LNLS. Em 2003, foram publicados 137 artigos científicos indexados, onde destacamos cinco *Physical Review Letters*, uma *Europhysics Letters* e quatro *Journal of Biological Chemistry*, além de vários artigos em outras publicações de considerável impacto.

Ressaltamos, mais uma vez, a importância do modelo de Organização Social na gestão do LNLS, que permite a flexibilidade e otimização dos recursos disponíveis buscando aprimorar os meios de gestão em função das atividades finalísticas estabelecidas nas metas e indicadores de acompanhamento do Contrato de Gestão.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Finalmente, para o ano de 2004, a expectativa é manter e intensificar o nível das atividades do LNLS. Em particular, espera-se a retomada dos Programas Nacionais de Nanotecnologia e de Proteoma, áreas nas quais o LNLS tem excelentes condições para contribuir. Preocupa, no entanto, a situação financeira. O crescimento, desejável e necessário para a plena utilização das capacidades instaladas, exige um crescimento do orçamento. É necessário a recomposição do Orçamento da ABTLuS para que o laboratório possa operar com a eficiência e eficácia que lhe é reconhecida. Espera-se, também, a retomada dos investimentos por parte da FAPESP, após dois anos de reestruturação interna. Preocupa, no entanto, a situação do Fundo Setorial de Infraestrutura, tendo em vista que a ABTLuS não teve projetos significativos aprovados em 2003 que permitiriam manter o nível de investimento necessário.

E. APÊNDICES

E.1 – Publicações

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Artigos Publicados em Periódicos Indexados por pesquisadores da ABTLuS [Os nomes sublinhados são de pesquisadores do quadro próprio da ABTLuS]

- 1 *Characterization of a new family of proteins that interact with the C-terminal region of the human chromatin-remodeling factor CHD-3*

Lemos, T. A., Passos, D. O., Nery, F. C., Kobarg, J.

FEBS Letters, 533: 14-20 (2003)

- 2 *Identification and characterization of proteins that selectively interact with isoforms of the mRNA binding protein AUF1 (hnRNP D)*

Moraes, K. C. M., Quaresma, A. J. C., Nery, F. C., Kobarg, J.

Biological Chemistry, 384: 25-37 (2003)

- 3 *Fast purification of the Apo form and of a non-binding heme mutant of recombinant sperm whale myoglobin*

Ribeiro-Júnior, E. A., Regis, W. C. B., Tasic, L., Ramos, C. H. I.

Protein Expression & Purification, 28: 202-8 (2003)

- 4 *Plasmodium falciparum histidine-rich protein II binds to actin, phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate and erythrocyte ghosts in pH-dependent manner and undergoes coil-to-helix transitions in anionic micelles*

Benedetti, C. E., Kobarg, J., Pertinhez, T. A., Gatti, R., Souza, O. N. de, Spisni, A., Meneghini, R.

Molecular & Biochemical Parasitology, 128: 157-66 (2003)

- 5 *Polarization dependent effects in photo-fragmentation dynamics of free molecules*

Mocellin, A., Marinho, R. R., Coutinho, L. H., Burmeister, F., Wiesner, K, Brito, A. N. de

Chemical Physics, 289: 163-74 (2003)

- 6 *Distribution and incorporation of zinc in biological calcium phosphates*

Barrea, R. A., Perez, C. A., Ramos, A. Y., Sánchez, H. J., Grenón, M.

X-Ray Spectrometry, 32: 387-95 (2003)

- 7 *Structural, magnetic, and transport properties of Co Nanoparticles within a Cu matrix*

Cezar, J. C., Tolentino, H. C. N., Knobel, M.

Physical Review B, 68: 054404-1-10 (2003)

- 8 **Free human mitochondrial GrpE is a symmetric dimer in solution**

Borges, J. C., Fischer, H., Craievich, A. F., Hansen, L. D., Ramos, C. H. I.

The Journal of Biological Chemistry, 278: 35337-44 (2003)

- 9 *Structural investigations of octadecylphosphonic acid multilayers*

Fontes, G. N., Malachias, A., Paniago, R.M., Neves, B. R. A.

Langmuir, 19: 3345-9 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 10 *Controlling alloy composition of InAsP self-assembled quantum dots embedded in GaAs*
Maltez, R. L., Ribeiro, E., Carvalho Jr., W., Ugarte, D., Medeiros-Ribeiro, G.
Journal of Applied Physics, 94: 3051-6 (2003)
- 11 *Evidence for spontaneous spin-polarized transport in magnetic nanowires*
Rodrigues, V., Bettini, J., Silva, P. C., Ugarte, D.
Physical Review Letters, 91: 096801-1-4 (2003)
- 12 *Crystallization, data collection and phasing of black-eyed pea trypsin/chymotrypsin inhibitor in complex with bovine Beta-trypsin*
Barbosa, J. A. R. G., Teles, R. C. L., Forrer, V. P., Guimarães, B. G., Medrano, F. J., Ventura, M. M., Freitas, S. M.
Acta Crystallographica D, 59: 1828-30 (2003)
- 13 *Dynamical mean-field theory of quantum stripe glasses*
Westfahl Jr., H., Schmalian, J., Wolynes, P. G.
Physical Review B, 68: 134203-1-10 (2003)
- 14 **Local anisotropy in strained manganite thin films**
Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Favre-Nicolind, E., Rannod, L.
Applied Physics Letters, 83: 3587-9 (2003)
- 15 *Identification of proteins that interact with the central coiled-coil region of the human protein kinase NEK1*
Surrpili, M. J., Delben, T. M., Kobarg, J.
Biochemistry, 42: 15369-76 (2003)
- 16 *3D composition of epitaxial nanocrystals by anomalous X-ray diffraction: observation of a Si-rich core in Ge domes on Si(100)*
Malachias, A., Kycia, S. W., Medeiros-Ribeiro, G., Paniago, R.M., Kamins, T. I., Stanley Williams, R.
Physical Review Letters, 91: 176101-1-4(2003)
- 17 *High-resolution X-ray diffraction beamline at the LNLS for the study of charge, orbital and magnetic structures*
Giles, C., Yokaichiya, F., Kycia, S. W., Sampaio, L. C., Ardiles-Saravia, D. C., Franco, M. K. K., Neuenschwander, R. T.
Journal of Synchrotron Radiation, 10: 430-4 (2003)
- 18 *Structural genomics of phytopatogen Xanthomonas axonopodis pv. citri - NMR characterization of ApaG/corD protein*
Katsuyama, A. M., Farah, C. S., Galvão-Botton, L. M. P., Almeida, F. C. L., Valente, A. P., Spisni, A., Pertinhez, T. A.
Biophysical Journal, 84: 174a (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 19 *A Monte Carlo model of the MCD behavior of hematite colloids*
Castro, A. R. B., Zysler, R. D.
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 257: 51-7 (2003)
- 20 *Low resolution structures of the retinoid X receptor DNA-binding and ligand-binding domains revealed by synchrotron X-ray solution scattering*
Fischer, H., Dias, S. M. G., Santos, M. A. M., Alves, A. C.,
Zanchin, N. I. T., Craievich, A. F., Apriletti, J. W., Baxter, J. D.,
Webb, P., Neves, F. A. R., Ribeiro, R. C. J., Polikarpov, I.
The Journal of Biological Chemistry, 278: 16030-8 (2003)
- 21 *Persistent conformational heterogeneity of triosephosphate isomerase: separation and characterization of conformational isomers in solution*
Moreau, V. H., Rietveld, A. W. M., Ferreira, S. T.
Biochemistry, 42: 14831-7 (2003)
- 22 *Structural comparison of Escherichia coli L-asparaginase in two monoclinic space groups*
Sanches, M., Barbosa, J. A. R. G., Oliveiro, R. T., Neto, J. A.,
Polikarpov, I.
Acta Crystallographica D, 59: 416-22 (2003)
- 23 *The influence of oxygen in the photoexpansion of GaGeS glasses*
Messaddeq, S. H., Mastelaro, V. R., Tabacniks, M. H., Lezal, D.,
Ramos, A. Y., Messaddeq, Y.
Applied Surface Science, 205: 143-50 (2003)
- 24 *Geometrical information on core-excited states obtained from interference quenching of vibrational states in resonant X-ray photoemission*
Baev, A., Feifel, R., Gel'Mukhanov, F. K., Agren, H., Piancasteli,
M. N., Bäessler, M., Miron, C., Brito, A. N. de, Björneholm, O.,
Karlsson, L., Svensson, S.
Physical Review A, 67: 022713 (2003)
- 25 *Influence of chemical bonds on the lifetime of the molecular-field-split 2p levels in H₂S*
Brito, A. N. de, Fink, R. F., Bäessler, M., Björneholm, O.,
Burmeister, F., Feifel, R., Miron, C., Sorensen, S. L., Wang, H.,
Svensson, S.
Physical Review A, 67: 022714-1-7 (2003)
- 26 *Influence of the coupling between center of mass and internal degrees of freedom on the binding energy of magnetotriions*
Dacal, L. C. O., Brum, J. A.
Physical Review B, 67: 033306-1-4 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 27 *Role of structural evolution in the quantum conductance behavior of gold nanowires during stretching*
Rego, L. G. C., Rocha, A. R., Rodrigues, V., Ugarte, D.
Physical Review B, 67: 045412-1-10 (2003)
- 28 *Gene structure and M20T polymorphism of the Schistosoma mansoni Sm14 fatty acid-binding protein - molecular, functional, and immunoprotection analysis*
Ramos, C. R. R., Figueiredo, R. C. R., Pertinhez, T. A., Vilar, M. M., Tendler, M., Raw, I., Spisni, A., Ho, P. L.
Journal of Biological Chemistry, 278:12745-51 (2003)
- 29 *Ordered arrays of rare-earth silicide nanowires on Si(001)*
Ragan, R., Chen, Y., Ohlberg, D. A. A., Medeiros-Ribeiro, G., Williams, R. S.
Journal of Crystal Growth, 251: 657-61 (2003)
- 30 *Structural analysis of Tityus serrulatus Ts1 neurotoxin at atomic resolution: insights into interactions with Na⁺ channels*
Pinheiro, C. B., Marangoni, S., Toyama, M., Polikarpov, I.
Acta Crystallographica D, 59: 405-15 (2003)
- 31 *The structure of the D49 phospholipase A2 piratoxin III from Bothrops pirajai reveals unprecedented structural displacement of the calcium-binding loop: possible relationship to cooperative substrate binding*
Rigden, D. J., Wen-Hwa, L., Marangoni, S., Toyama, M. H., Polikarpov, I.
Acta Crystallographica D, 59: 255-62 (2003)
- 32 *Arsenic sorption onto soils enriched in Mn and Fe minerals*
Deschamps, E., Ciminelli, V. S. T., Weidler, P. G., Ramos, A. Y.
Clays and Clay Minerals, 51: 197-204 (2003)
- 33 *Cloning and expression of calglandulin, a new EF-hand protein from the Venom Glands of Bothrops insularis snake in E. coli*
Junqueira-de-Azevedo, I. L. M., Pertinhez, T. A., Spisni, A., Carreño, F. R., Farah, C. S., Ho, P. L.
Biochimica et Biophysica Acta, 1648: 90-8 (2003)
- 34 *Structural and thermal study of calcium undecanoate*
Valor, A., Kycia, S. W., Torres-Garcia, E., Reguera, E., Vázquez-Ramos, C., Sanchez-Sinencio, F.
Journal of Solid State Chemistry, 172: 471-9 (2003)
- 35 *Incorporation of Ni into natural goethite: an investigation by X-ray absorption spectroscopy*
Carvalho-e-Silva, M. L. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Enzweiler, J., Netto, S. M., Alves, M. C. M.
American Mineralogist, 88: 876-82 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

36 *Determination of Ga interdiffusion in InAs: GaAs(001) islands by X-ray reciprocal space mapping*

Malachias, A., Rodrigues, W. N., Moreira, M. V. B., Kycia, S. W.,
Paniago, R.M.

Journal of Physics D: Applied Physics, 36: A249-A52 (2003)

37 *Selective probing of the electronic structure of free clusters using resonant core-level spectroscopy*

Tchaplyguine, M., Feifel, R., Marinho, R. R. T., Gisselbrecht, M.,
Sorensen, S. L., Brito, A. N. de, Svensson, S., Björneholm, O.

Chemical Physics, 289: 3-13 (2003)

38 *Role of V/III ratio on atomic ordering and surface morphology of InGaP layers grown by chemical beam epitaxy*

Bettini, J., Carvalho, M. M. G. de, Cotta, M. A., Ugarte, D.

Surface Science, 540: 129-35 (2003)

39 *Structural, magnetic, and Mössbauer characterization of size-controlled iron-iron oxide nanoparticles obtained by chemical methods*

Vargas, J. M., Socolovsky, L.M., Goya, G. F., Knobel, M.,
Zanchet, D.

IEEE Transactions on Magnetics, 39: 2681-3 (2003)

40 *Folding and stability of the extracellular domain of the human amyloid precursor protein*

Botelho, M. G., Gralle, M., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Ferreira, S. T.

Journal of Biological Chemistry, 278: 34259-67 (2003)

41 *Piezoelectric coefficients of L-arginine hydrochloride monohydrate obtained by X-ray multiple diffraction using synchrotron radiation*

Almeida, J. M. A., Miranda, M. A. R., Remédios, C. M. R., Melo,
F. E. A., Freire, P. T. C., Sasaki, J. M., Cardoso, L. P., Santos, A.
O. dos, Kycia, S. W.

Journal of Applied Crystallography, 36: 1348-51 (2003)

42 *One-step route to iron oxide-filled carbon nanotubes and bucky-onions based on the pyrolysis of organometallic precursors*

Schnitzler, M. C., Oliveira, M. M., Ugarte, D., Zarbin, A. J. G.

Chemical Physics Letters, 381: 541-8 (2003)

43 *Inhomogeneous magnetism in La-doped CaMnO₃. I. Mesoscopic phase separation due to lattice-coupled ferromagnetic interactions*

Ling, C. D., Granado, E., Neumeier, J. J., Lynn, J. W., Argyrion,
D. N.

Physical Review B, 68: 134439-1-8 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 44 *Inhomogeneous magnetism in La-doped CaMnO₃. II. Nanometric-scale spin cluster and long-range spin clusters and long-range canting*

Granado, E., Ling, C. D., Neumeier, J. J., Lynn, J. W., Argyrion, D. N.

Physical Review B, 68: 134440-1-6 (2003)

- 45 *Solution structure of a peptide corresponding to the first extracellular loop of the B1 kinin receptor*

Oliveira, V., Machado, M. F. M., Sforça, M. L., Figueiredo, R. C. R., Nakaie, C. R., Pesquero, J. B., Chagas, J. R., Pertinhez, T. A., Spisni, A., Araújo, R. C.

Biopolymers, 71: P106 (2003)

- 46 *Structure-activity relationship study of the antimicrobial fragment 33-61 of bovine hemoglobin*

Machado, A., Sforça, M. L., Daffre, S., Miranda, A., Spisni, A., Pertinhez, T. A., Miranda, M. T. M.

Biopolymers, 71: P318 (2003)

- 47 *Closed conformation of the active site loop of rabbit muscle triosephosphate isomerase in the absence of substrate: evidence of conformational heterogeneity*

Aparicio, R., Ferreira, S. T., Polikarpov, I.

Journal of Molecular Biology, 334: 1023-41 (2003)

- 48 *Equilibrium model of bimodal distributions of epitaxial island growth*

Sutton, A. P., Rudd, R. E., Briggs, G. A. D., Medeiros-Ribeiro, G., Williams, R. S.

Physical Review Letters, 90: 146101-1-4 (2003)

- 49 *Solution structure of crotamine, a Na⁺ channel affecting toxin from *Crotalus durissus terrificus* venom*

Nicastro, G., Franzoni, L., Chiara, C. de, Mancin, A. C., Giglio, J. R., Spisni, A.

European Journal Biochemistry, 270: 1969-79 (2003)

- 50 *Conformational features of a synthetic model of the first extracellular loop of the angiotensin II AT(1A) receptor*

Nicastro, G., Peri, F., Franzoni, L., Chiara, C. de, Sartor, G., Spisni, A.

Journal of Peptide Science, 9: 229-43 (2003)

- 51 *Introduction of a chemical constraint in a short peptide derived from human acidic fibroblast growth factor elicits mitogenic structural determinants*

Kiyota, S., Franzoni, L., Nicastro, G., Benedetti, A., Oyama, S.T., Viviani, W., Gambarini, A. G., Spisni, A.

Journal of Medicinal Chemistry, 46: 2325-33 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 52 *Analysis of 6-(2,2-Dichloroacetamido) chryseno interaction with the hypoxanthine phosphoribosyltransferase from Trypanosoma cruzi*

Medrano, F. J., Wenck, M. A., Engel, J. C., Craig III, S. P.

Journal of Medicinal Chemistry, 46: 2548-50 (2003)

- 53 *Picturing molecular femtosecond processes through an ultra-fast controllable X-ray shutter*

Baev, A., Salek, P., Gel'Mukhanov, F. K., Agren, H., Brito, A. N. de, Björneholm, O., Svensson, S.

Chemical Physics, 289: 51-6 (2003)

- 54 *Influence of phosphine on Ge/Si(001) island growth by chemical vapor deposition*

Kamins, T. I., Medeiros-Ribeiro, G., Ohlberg, D. A. A., Williams, R. S.

Physical Review Letters, 94: 4215-24 (2003)

- 55 *Transport signatures of correlated disorder in a two-dimensional electron gas*

Heinzel, T., Jaggi, R., Ribeiro, E., Waldkirch, M. V., Ensslin, K., Ulloa, S. E., Medeiros-Ribeiro, G., Petroff, P. M.

Europhysics Letters, 61: 674-80 (2003)

- 56 *Valence photoionization and resonant core excitation of ozone - experimental and theoretical study of the C-state of O₃⁺*

Wiesner, K, Fink, R. F., Sorensen, S. L., Andersson, M., Feifel, R., Hjelte, I., Miron, C., Brito, A. N. de, Rosenqvist, L., Wang, H., Svensson, S., Björneholm, O.

Chemical Physics Letters, 375: 76-83 (2003)

- 57 *Biological applications of colloidal nanocrystals*

Parak, W. J., Gerion, D., Pellegrino, T., Zanchet, D., Micheel, C. M., Williams, S. C., Boudreau, R., Le Gros, M., Larabell, C., Alivisatos, A. P.

Nanotechnology, 14: R15-27 (2003)

- 58 *Precipitation kinetics in Al-Zn-Mg commercial alloys*

Ferragut, R., Somoza, A., Tolley, A., Torriani, I.

Journal of Materials Processing Technology, 141: 35-40 (2003)

- 59 *Functional roles for amino acids in active site loop II of a hypoxanthine phosphoribosyltransferase*

Medrano, F. J., Wenck, M. A., Eakin, A. E., Craig III, S. P.

Biochimica et Biophysica Acta, 1650: 105-16 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

60 *Role of stray light in the formation of high-resolution resonant photoelectron spectra: an experimental and theoretical study of N₂*

Feifel, R., Baev, A., Gel'Mukhanov, F. K., Agren, H., Andersson, M., Öhrwall, G., Piancastelli, M. N., Miron, C., Sorensen, S. L., Brito, A. N. de , Björneholm, O., Karlsson, L., Svensson, S.

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 134: 49-65
(2003)

**Artigos Publicados em Periódicos Indexados por Colaboradores
e Pesquisadores Externos**

- 1 *Determination of L-subshell Coster-Kronig and fluorescence yields of lanthanum and praseodymium by synchrotron radiation photoionization*
Barrea, R. A., Perez, C. A., Sánchez, H. J.
Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 58: 51-62 (2003)
- 2 *Spatial ordering in InP/InGaP nanostructures*
Bortoleto, J. R. R., Gutiérrez, H. R., Cotta, M. A., Bettini, J.,
Cardoso, L. P., Carvalho, M. M. G. de
Applied Physics Letters, 82: 3523-5 (2003)
- 3 *First experiments on diffraction-enhanced imaging at LCLS*
Giles, C., Hönnicke, M. G., Lopes, R. T., Rocha, H. S., Gonçalves,
O. D., Mazzaro, I., Cusatis, C.
Journal of Synchrotron Radiation, 10: 421-3 (2003)
- 4 *Nanoscale Pt(0) particles prepared in imidazolium room temperature ionic liquids: synthesis from an organometallic precursor, characterization, and catalytic properties in hydrogenation reactions*
Scheeren, C. W., Machado, G., Dupont, J., Fichtner, P. F. P., Teixeira,
S. R.
Inorganic Chemistry, 42: 4738-42 (2003)
- 5 *The use of imidazolium ionic liquids for the formation and stabilization of Ir⁰ and Rh⁰ nanoparticles: efficient catalysts for the hydrogenation of arenes*
Fonseca, G. S., Umpierre, A. P., Fichtner, P. F. P., Teixeira, S. R.,
Dupont, J.
Chemistry - A European Journal, 9: 3263-9 (2003)
- 6 *Preparation and characterization of TiO₂ and V₂O₅ nanoparticles produced by ball-milling*
Guimarães, J. L., Abbate, M., Alves, M. C. M., Betim, S. B.
Journal of Alloys and Compounds, 352: 16-20 (2003)
- 7 *Isothermal aggregation of Bi atoms embedded in a soda borate glass: coarsening of liquid nanodroplets and atomic diffusion*
Kellermann, G., Craievich, A. F.
Physical Review B, 67: 085405-1-7 (2003)
- 8 *Setup for in situ WAXS/SAXS studies of the formation and growth of Bi nanodroplets and the melting of Bi nanocrystals using synchrotron radiation*
Kellermann, G., Craievich, A. F., Neuenschwander, R. T., Plivelic,
T. S.
**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 199:
112-6 (2003)**

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 9 *Purification and primary structure determination of Tf4, the first bioactive peptide isolated from the venom of the Brazilian scorpion Tityus fasciolatus*
Wagner, S., Castro, M. S., Barbosa, J. A. R. G., Fontes, W.,
Schwartz, E. N. F., Sebben, A., Pires Jr., O. R., Sousa, M. V.,
Schwartz, C. A.
Toxicon, 41: 737-45 (2003)
- 10 *XAS study of the nickel(alpha-diimine) catalyst for olefin polymerization*
Souza, R. F. de, Simon, L. C., Alves, M. C. M.
Journal of Catalysis, 214: 165-8 (2003)
- 11 *LixMn2O4 thin films characterization by X-ray, electrical conductivity and XANES*
Meneses, C. T., Macedo, M. A., Vicentin, F. C.
Microelectronics Journal, 34: 561-3 (2003)
- 12 *Small angle X-ray scattering of the hemoglobin from Biomphalaria glabrata*
Oliveira, C. L. P., Regis, W. C. B.
Biopolymers, 69: 470-9 (2003)
- 13 *Comparison of nuclear and X-ray techniques for actinide analysis of environmental hot particles*
Török, S., Olsán, J., Vincze, L., Alföldy, B., Kerkápoly, A., Vajda,
N., Perez, C. A., Falkenberg, G.
Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 18: 1202-9 (2003)
- 14 *Observation of elastic scattering effects on photoelectron angular distributions in free Xe clusters*
Öhrwall, G., Tchapyguine, M., Gisselbrecht, M., Lundwall, M.,
Feifel, R., Rander, T., Schulz, J., Marinho, R. R. T., Lindgren, A.,
Sorensen, S. L., Svensson, S., Björneholm, O.
Journal of Physics B, 36: 3937-49 (2003)
- 15 *Photoluminescence at room temperature in amorphous SrTiO3 thin films obtained by chemical solution deposition*
Pontes, F. M., Longo, E., Leite, E. R., Lee, E. J. H., Varela, J. A.,
Pizani, P. S., Mastelaro, V. R.
Materials Chemistry and Physics, 77: 598-602 (2003)
- 16 *EXAFS, X-ray diffraction and Mossbauer studies of an amorphous Fe60Ti40 alloy produced by mechanical alloying*
Lima, J. C., Machado, K. D., Drago, V., Grandi, T. A., Campos, C.
E. M., Trichês, D. M.
Journal of Non-Crystalline Solids, 318: 121-30 (2003)
- 17 *Crystal structure of a trimeric form of dephosphocoenzyme a kinase from Escherichia coli*
O'Toole, N., Barbosa, J. A. R. G., LI, Y., Hung, L.W., Matte, A.,
Cygler, M.
Protein Science, 12: 327-36 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 18 *Structural characterization of the V2O5/TiO2 system obtained by the sol-gel method*
Rodella, C. B., Mastelaro, V. R.
Journal of Physics and Chemistry of Solids, 64: 833-9 (2003)
- 19 *Characterization of iron, copper and zinc levels in colostrum of mothers of term and pre-term infants before and after pasteurization*
Costa, R. S. S. da, Carmo, M. G. T. do, Saunders, C., Jesus, E. F.
O. de, Lopes, R. T., Simabuco, S. M.
International Journal of Food Science and Nutrition, 54: 111-7 (2003)
- 20 *About the nanoporosity elimination above 800° C xerogels prepared from TEOS sono-hydrolysis*
Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Silva, J. S. P. da
Physica Status Solidi A, 196: 379-83 (2003)
- 21 *Characterization of the porosity developed in a new titania-alumina catalyst support prepared by the sol gel route*
Kaneko, E. Y., Pulcinelli, S. H., Santilli, C. V., Craievich, A. F.,
Chiaro, S. S. X.
Journal of Applied Crystallography, 36: 469-72
- 22 *Domain motions and quaternary packing of phosphofructokinase-2 from Escherichia coli studied by small angle X-ray scattering and homology modeling*
Cabrera, R., Fischer, H., Trapani, S., Craievich, A. F., Garratt, R.
C., Babul, J.
The Journal of Biological Chemistry, 278: 12913-9 (2003)
- 23 *Gelation and drying of weakly bonded silica-PPO nanocomposites*
Chaker, J. A., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H.,
Craievich, A.
Journal of Applied Crystallography, 36: 689-93 (2003)
- 24 *Nanostructure and properties of ZnO films produced by pyrosol process*
Hammer, P., Tokumoto, M. S., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H.,
Craievich, A. F., Smith, A.
Journal of Applied Physics, 36: 435-8 (2003)
- 25 *The peculiar thermo-structural behavior of the anionic lipid DMPG*
Lamy-Freund, T., Riske, K. A.
Chemistry and Physics of Lipids, 122: 19-32 (2003)
- 26 *Small-angle X-ray and nuclear-magnetic resonance study of siloxane-PMMA hybrids prepared by the sol-gel process*
Sarmiento, V. H. V., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S.
H., Craievich, A. F.
Journal of Applied Crystallography, 36: 473-7 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 27 *Small-angle X-ray scattering and X-ray absorption near-edge structure study of iron-doped siloxane-polyoxyethylene nanocomposites*
Chiavacci, L. A., Dahmouche, K., Briois, V., Santilli, C. V., Zea Bermudez, V. de, Carlos, L. D., Jolivet, J. P., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F.
Journal of Applied Crystallography, 36: 405-9 (2003)
- 28 *Structural characterization of undoped and Sb-doped SnO₂ thin films fired at different temperatures*
Rizzato, A. P., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F.
Journal of Applied Crystallography, 36: 736-9 (2003)
- 29 *Structural and magnetic properties of TM-SiO₂ (TM = Fe, Co, Ni) films*
Socolovsky, L.M., Denardin, J. C., Brandl, A. L., Knobel, M., Zhang, X. X.
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 262: 102-6 (2003)
- 30 *Synchrotron SAXS study of the mechanisms of aggregation of sulfate zirconia sols*
Riello, P., Minesso, A., Craievich, A., Benedetti, A.
Journal of Physical Chemistry B, 107: 3390-9 (2003)
- 31 *Structure of luminescent mono and di-urethanesil nanocomposites doped with Eu³⁺ ions*
Dahmouche, K., Gonçalves, M. C., Santilli, C. V., Zea Bermudez, V. de, Carlos, L. D., Craievich, A. F.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 199: 117-22 (2003)
- 32 *Time evolution of Cr and N on AISI 304 steel surface during pulsed plasma ion nitriding*
Feugeas, J. N., Gomez, B. J., Sánchez, G, Ferron, J., Craievich, A.
Thin Solid Films, 424: 130-8 (2003)
- 33 *Trifluoperazine effects on anionic and zwitterionic micelles: a study by small angle X-ray scattering*
Caetano, W., Barbosa, L. R. S., Itri, R., Tabak, M.
Journal of Colloid and Interface Science, 260: 414-22 (2003)
- 34 *Structural study aged saturated silica gels obtained from tetramethoxysilane sonohydrolysis with different water/tetramethoxysilane molar ratio*
Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Castro, W. C. de
Physical Review B, 67: 184207-1-5 (2003)
- 35 *A systematic study of bovine serum albumin (BSA) and sodium dodecyl sulfate (SDS) interactions by surface tension and small angle X-ray scattering*
Santos, S. F., Zanette, D., Fischer, H., Itri, R.
Journal of Colloid and Interface Science, 262: 400-8 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 36 *The silicon neighborhood across the a-Si:H to muc-Si transition by X-ray absorption spectroscopy (XAS)*
Tessler, L. R., Wang, Q., Branz, H. M.
Thin Solid Films, 430: 83-6 (2003)
- 37 *An X-ray diffractometer for accurate structural invariant phase determination*
Morelhão, S. L.
Journal of Synchrotron Radiation, 10: 236-41 (2003)
- 38 *Hybrid and effective satellites for studying superlattices*
Morelhão, S. L., Quivy, A. A., Härtwig, J.
Microelectronics Journal, 34: 695-9 (2003)
- 39 *Small angle X-ray scattering study of meso-tetrakis (4-Sulfonatophenyl) porphyrin in aqueous solution: a self-aggregation model*
Gandini, S. C. M., Gelamo, E. L., Itri, R., Tabak, M.
Biophysical Journal, 85: 1259-68 (2003)
- 40 *Mixed-oxide formation during preparation of alumina-supported zirconia: an EXAFS and DFT study*
Faro Jr., A. C., Souza, K. R., Eon, J. G., Leitão, A. A., Rocha, A. B., Capaz, R. B.
Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP), 5: 3811-7 (2003)
- 41 *X-ray transmission microtomography using synchrotron radiation*
Lopes, R. T., Rocha, H. S., Jesus, E. F. O. de, Barroso, R. C.,
Oliveira, L. F. de, Anjos, M. J. dos, Braz, D., Moreira, S.
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 505: 604-7 (2003)
- 42 *Structure of extremely nanosized and confined In-O species in ordered porous materials*
Ramallo-López, J. M., Renteria, M., Miró, E. E., Requejo, F. G.,
Traverse, A.
Physical Review Letters, 91: 108304-1-4 (2003)
- 43 *Analysis of medicinal plants and crude extracts by synchrotron radiation total reflection X-ray fluorescence*
Salvador, M. J., Dias, D. A., Moreira, S., Zucchi, O. L. A. D.
Journal of Trace and Microprobe Techniques, 21: 377-88 (2003)
- 44 *Measurement of K-line transition rates for Ti, V Cr, Mn, Fe and Co using synchrotron radiation*
Carreras, A., Stutz, G., Castellano, G.
Radiation Physics and Chemistry, 67: 703-6 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 45 *Accurate triplet phase determination in non-perfect crystals - a general phasing procedure*
Morelhão, S. L.
Acta Crystallographica A, 59: 470-80 (2003)
- 46 *(Ti, Sn)O₂ mixed oxides nanoparticles obtained by the sol-gel route*
Oliveira, M. M., Schnitzler, D. C., Zarbin, A. J. G.
Chemistry of Materials, 15: 1903-9 (2003)
- 47 *Electrochemical behavior and structural changes of V₂O₅ xerogel*
Huguenin, F., Torresi, R. M.
Journal of Brazilian Chemical Society, 14: 536-43 (2003)
- 48 *Analysis of the nanopores produced in nickel and palladium by high hydrogen pressure*
dos Santos, D. S.
Journal of Alloys and Compounds, 356: 258-62 (2003)
- 49 *Comparison of V₂O₅ xerogels prepared by the Vanadate and alkoxide routes using X-ray absorption and other methods*
Holland, G. P., Huguenin, F., Torresi, R. M., Buttry, D. A.
Journal of the Electrochemical society, 150: A721-5 (2003)
- 50 *Pressure-induced physical changes of noble gases implanted in highly stressed amorphous carbon films*
Lacerda, R. G., Santos, M. C. dos, Tessler, L., Hammer, P., Alvarez, F., Marques, F. C.
Physical Review B, 68: 054104-1-7 (2003)
- 51 *Parallel measurement of Ca²⁺ binding and fluorescence emission upon Ca²⁺ titration of recombinant skeletal muscle troponin C*
Valencia, F. F. de, Paulucci, A. A., Quaggio, R. B., Silva, A. C. R. da, Farah, C. S., Reinach, F. de C.
The Journal of Biological Chemistry, 278: 11007-14 (2003)
- 52 *High-throughput screening of structural proteomics targets using NMR*
Galvão-Botton, L. M. P., Katsuyama, A. M., Guzzo, C. R., Almeida, F. C. L., Farah, C. S., Valente, A. P.
FEBS Letters, 552: 207-13 (2003)
- 53 *Electrochemical and X-ray absorption spectroscopy studies of cobalt coatings on a hydrogen storage alloy*
Ambrósio, R. C., Ticianelli, E. A.
Journal of the Electrochemical Society, 150: E438-43 (2003)
- 54 *Recent studies of internal and surface nucleation in silicate glasses*
Zanotto, E.D., Fokin, V. M.
Transactions on Royal Society London A, 361: 591-615 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 55 *Diffraction patterns of stacked layer crystals*
Estevez-Rams, E., Aragon-Fernandez, B., Fuess, H., Penton-Madrigal, A.
Physical Review B, 68: 064111-1-12 (2003)
- 56 *Structure of magnetic poly(oxyethylene)-siloxane nanohybrids doped with FeII and FeIII I*
Silva, N. J. O., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Amaral, V. S., Carlos, L. D., Zea Bermudez, V. de, Craievich, A. F.
Journal of Applied Crystallography, 36: 961-6 (2003)
- 57 *Giant hall effect in superparamagnetic granular films*
Denardin, J. C., Knobel, M., Zhang, X. X., Pakhomov, A. B.
Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 262: 15-22 (2003)
- 58 *Modifying the nanostructure of Co[SiO₂] samples by controlled annealing*
Denardin, J. C., Knobel, M., Socolovsky, L.M., Brandl, A. L., Zhang, X. X.
IEEE Transactions on Magnetics, 39: 2767-9 (2003)
- 59 *Blocking phenomena in granular magnetic alloys through magnetization, hall effect, and magnetoresistance experiments*
Denardin, J. C., Pakhomov, A. B., Brandl, A. L., Socolovsky, L.M., Knobel, M., Zhang, X. X.
Applied Physics Letters, 82: 763-5 (2003)
- 60 *Comparison between intensity jumps in experimental, simulated and theoretical multielemental spectra*
Figueroa, R., Garcia, M., Brusa, D.
X-Ray Spectrometry, 32: 307-11 (2003)
- 61 *Selective excitation and integral counting of X-ray fluorescence (SEICXRF)*
Figueroa, R.
X-Ray Spectrometry, 32: 299-306 (2003)
- 62 *Initiating structural studies of LYS49-PLA2 homologues complexed with an anionic detergent, a fatty acid and a natural lipid*
Watanabe, L., Fontes, M. R. M., Soares, A. M., Giglio, J. R., Arni, R. K.
Protein and Peptide Letters, 10: 1-6 (2003)
- 63 *XPS and XAFS Pt L_{2,3}-edge studies of dispersed metallic Pt and PtSn clusters on SiO₂ obtained by organometallic synthesis: structural and electronic characteristics*
Ramallo-López, J. M., Santori, G. F., Giovanetti, L., Casella, M. L., Ferretti, O. A., Requejo, F. G.
Journal of Physical Chemistry B, 107: 11441-51 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

- 64 *Nanofibers composite vanadium oxide/polyaniline: synthesis and characterization of an electroactive anisotropic structure*
Malta, M., Louarn, G., Errien, N., Torresi, R. M.
Electrochemistry Communications, 5: 1011-15 (2003)
- 65 *Crystallization, preliminary X-ray analysis and molecular-replacement solution of haemoglobin-II from the fish matrinxã (*Brycon cephalus*)*
Fonseca, J. C. L., Honda, R. T., Delatorre, P., Fadel, V., Bonilla-Rodrigues, G. O., Azevedo Jr., W. F. de
Acta Crystallographica D, 59: 752-4 (2003)
- 66 *Crystal structure of human purine nucleoside phosphorylase complexed with acyclovir*
Santos, D. M. dos, Canduri, F., Pereira, J. H., Silva, R. G., Mendes, M. A., Palma, M.S., Basso, L. A., Azevedo Jr., W. F. de, Santos, D. S.
Biochemical and Biophysical Research Communications, 308: 553-9 (2003)
- 67 *Structural basis for inhibition of human PNP by immucillin-H*
Azevedo Jr., W. F. de, Canduri, F., Santos, D. M. dos, Pereira, J. H., Dias, M. V. B., Silva, R. G., Mendes, M. A., Basso, L. A., Palma, M.S., Santos, D. S.
Biochemical and Biophysical Research Communications, 309: 917-22 (2003)
- 68 *Docking and small angle X-ray scattering studies of purine nucleoside phosphorylase*
Azevedo Jr., W. F. de, Santos, G. C. dos, Santos, D. M. dos, Olivieri, J. R., Canduri, F., Silva, R. G., Basso, L. A., Renard, G., Fonseca, I. O. da, Mendes, M. A., Palma, M.S., Santos, D. S.
Biochemical and Biophysical Research Communications, 309: 923-8 (2003)
- 69 *Magnetotransport, magnetic, and structural properties of TM-SiO₂ (TM=Fe, Co, Ni) granular alloys*
Socolovsky, L.M., Denardin, J. C., Brandl, A. L., Knobel, M.
Materials Characterization, 50: 117-21 (2003)
- 70 *Structural evolution of aerogels prepared from TEOS sono-hydrolysis upon heat treatment up to 1100grausC*
Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Castro, W. C. de
Journal of Non-Crystalline Solids, 332: 73-9 (2003)
- 71 *Structure of redispersable SnO₂ nanoparticles*
Brito, G. E. S., Fischer, H., Craievich, A. F., Gonçalves, R. R., Ribeiro, S. J. L.
Journal of Sol-Gel Science and Technology, 28: 45-50 (2003)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

72 *Analysis of mineral water from Brazil using total reflection X-ray fluorescence by synchrotron radiation*

Costa, A. C. M., Anjos, M. J. dos, Moreira, S., Lopes, R. T., Jesus, E. F. O. de

Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 58: 2199-204 (2003)

73 *Trace elements determination in red and white wines using total-reflection X-ray fluorescence*

Anjos, M. J. dos, Lopes, R. T., Jesus, E. F. O. de, Moreira, S., Barroso, R. C., Castro, C. R. F.

Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 58: 2227-32 (2003)

74 *Crystal structures of BnSP-7 and BnSP-6, two Lys49-phospholipases A2: quaternary structure and inhibition mechanism insights*

Magro, A. J., Soares, A. M., Giglio, J. R., Fontes, M. R. M.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 311: 713-20 (2003)

75 *Modelling the elastic scattering in diagnostic radiology: the importance of structure form factors*

Cardoso, S. C., Gonçalves, O. D., Schechter, H., Eichler, J.

Physics in Medicine and Biology, 48: 1907-16 (2003)

76 *Magnetic properties of an interlocked molecular magnet*

Novak, M. A., Vaz, M. G. F., Speziali, N. L., Costa, W. V., Stumpf, H. O.

Polyhedron, 22: 2391-4 (2003)

77 *TEM and XRD study of early crystallization of lithium disilicate glasses*

Soares Jr., P. C., Zanotto, E.D., Fokin, V. M., Jain, H.

Journal of Non-Crystalline Solids, 331: 217-27 (2003)

E.2 - Notas Técnicas

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

MeT 01/2003

[A Hybrid Multipolar Wiggler for Protein Crystallography at the LNLS Synchrotron Light Source](#)

Wiggler-protein crystallography Liu Lin, P.F. Tavares, FAC

This document describes the design guidelines and requirements that lead to the technical specifications for the LNLS multipolar wiggler for Protein Crystallography. Based on these specifications, LNL...

MeT 02/2003

[Numerical Modeling of Atomic Hydrogen response to Short VUV FEL Radiation Pulses](#)

VUV FEL A. Rubens B. de Castro, Thomas Moeller, IUV

We have solved the Schroedinger equation numerically for a hydrogen atom coupled to the radiation field of the DESY VUV FEL ...

MeT 03/2003

[Period Length Optimization for the LNLS Undulator](#)

Ondulador Ximenes R. Resende, FAC

The aim of the present work is to find the optimum magnetic period length for the LNLS Elliptically Polarizing Undulator (EPU). An objective function for the radiation which takes into consideration...

MeT 04/2003

[Bench Characterisation of the Booster Synchrotron Beam Position Monitors](#)

BPM Ruy H. A. Farias, FAC

This report presents an overall description of the booster synchrotron BPMs characterisation procedure. We describe the measurement set-up and the results obtained for the set of monitors now installe...

MeT 05/2003

[Analysis of static errors for a long rotating coil system](#)

insertion devices, sag, wire stacking, rotating coil Giancarlo Tosin, IMA

Abstract –In this paper, two sources of multipole errors related to rotating coils measurements are analyzed: the coil sag due to its own weight in planar insertion devices characterization, and the p...

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

E.3 - Relatório do Comitê Científico

E.4 - Resposta as Recomendações do Comitê Científico

E. 5 – Parecer dos Auditores Independentes

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Nota: O Contrato de Gestão CNPq/MCT – ABTLuS prevê, pelo menos, a apresentação de dois relatórios por ano, pela ABTLuS, sendo um relatório referente ao primeiro semestre do ano e um relatório referente ao período anual.

O Contrato de Gestão começou a vigorar no início de 1998.

Desde então foram apresentados os seguintes relatórios:

1. “RELATÓRIO 1 – PERÍODO janeiro a julho de 1998”, em agosto de 1998;
2. “RELATÓRIO ANUAL – 1998”, em fevereiro de 1999;
3. “RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a julho de 1999”, em fevereiro de 1999;
4. “RELATÓRIO ANUAL – 1999”, em fevereiro de 2000;
5. “RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a julho de 2000”, em agosto de 2000;
6. “RELATÓRIO ANUAL – 2000”, em fevereiro de 2001;
7. “RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2001”, e agosto de 2001;
8. “RELATÓRIO ESPECIAL – 1998 a 2001” em dezembro de 2001;
9. “RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2002”, em agosto de 2002;
10. “RELATÓRIO ANUAL – 2002”, em fevereiro de 2003;
11. “RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2003”, em agosto de 2003;

Relatório Anual
2003

Fevereiro de 2004

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/ MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2003

Este relatório foi aprovado pelo Conselho de Administração da ABTLuS – Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron – em reunião ordinária realizada em 13 de fevereiro de 2004.

Correspondência:
Caixa Postal 6192 – CEP 13084-971 – Campinas, São Paulo
Telefone (19) 3287-4520
<http://www.lnls.br>