

MEMBROS DO CONSELHO DE ADMINISTRAÇÃO DA ABTLuS

Rogério Cezar de Cerqueira Leite

(Presidente)

Adalberto Vasquez

Belita Koiller

Celso Varga

Celso Antonio 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

CONTEÚDO

SUMÁRIO EXECUTIVO	6
1. P, D & I com Luz Síncrotron.....	9
1.1 – Fonte de Luz Síncrotron.....	9
1.2– Manutenção das Linhas de Luz.....	14
1.3– Melhoramentos nas Linhas de Luz.....	14
1.4 – Implementar Novas Linhas de Luz.....	19
1.5 – Uso das Linhas de Luz.....	21
2. P, D & I em Micro e Nano-Tecnologia.....	26
2.1 – Manutenção e Melhoramentos da Infra-estrutura.....	26
2.2 - Apoio aos Pesquisadores Externos	29
3. P, D & I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia.....	32
3.1 - Manutenção e Melhoria da Infra-estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e em Biotecnologia.....	32
3.2 - Apoiar Pesquisadores Externos com a Infra-Estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia.....	33
4. P, D & I em Aceleradores	41
4.1 - Melhoramentos no Anel de Armazenamento	41
4.2 - Dispositivos de Inserção	46
5. Interação com o Setor Industrial	48
5.1 - Projetos de Desenvolvimento:.....	48
5.2 - Serviços	51
5.3 - Visitas de Promoção do LNLS e Outras Atividades	53
5.4 - Patentes.....	54
6. Informação, Educação e Divulgação.....	55
6.1 - Informação Científica e Administrativa	55
7. Gestão e Planejamento	62
7.1 – Relatório Financeiro	63
C. INDICADORES DE DESEMPENHO.....	66
CONCLUSÃO.....	75
Apêndices.....	76

LISTAS DE TABELAS

Tabela 1: Parâmetros de desempenho da fonte de luz síncrotron em 2004.	11
Tabela 2: Uso da fonte de luz síncrotron em 2004.	11
Tabela 3: Distribuição geográfica das propostas de pesquisa nas linhas de luz	21
Tabela 4: Propostas de pesquisa realizadas nas linhas de luz	22
Tabela 5: Principais parâmetros de uso da Fonte de Luz Síncrotron	25
Tabela 6: Resumo do uso das instalações do CeBiME por pesquisadores ligados à Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural	34
Tabela 7: Resumo do uso das instalações do CeBiME por membros da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo.	36
Tabela 8: Propostas agendadas para Espectrometrias de Massa	40
Tabela 9: Pesquisadores da ABTLuS.	58
Tabela 10: Estudantes de pós-graduação realizando suas teses no LNLS	59
Tabela 11: Pós-doutores sob supervisão	60
Tabela 12: Cursos realizados em 2004	61
Tabela 13: Recursos Totais da ABTLuS	64

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1: Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em operação para usuários em 2004.....	12
Gráfico 2: Desempenho da fonte de luz síncrotron durante a operação para usuários.	13
Gráfico 3: Tempo de vida médio do feixe em operação para usuários em 2004.....	13
Gráfico 4: Histórico dos auxílios concedidos	24
Gráfico 5: Evolução do número de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz durante o ano de 2004.	25
Gráfico 6: Horas de operação dos Microscópios Eletrônicos em 2004	27
Gráfico 7: Distribuição das Propostas de Pesquisas no LME em 2004.....	29
Gráfico 8: Perfil dos usuários do LME em 2004.	29
Gráfico 9: Perfil dos usuários do MTA em 2004	30
Gráfico 10: Distribuição por tempo de uso do LMF.	31
Gráfico 11: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear de 500 MHz	38
Gráfico 12: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear de 600 MHz	38
Gráfico 13: Evolução das publicações em periódicos indexados	57
Gráfico 14: Orçamento do Contrato de Gestão ABTLuS. Estão incluídos R\$ 855 mil que ainda não foram executados, estando como restos a pagar.....	63
Gráfico 15: Repasses e gastos do período de 2004.....	63
Gráfico 16: Perfil do Quadro Funcional do LNLS.....	65

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Linha SAXS2 aguardando últimos componentes. O berço porta amostra tem 5 m de comprimento e é feito inteiramente em alumínio estrutural..... 20

Figura 2: Conceito modular para a estrutura da nova blindagem de concreto da fonte de luz síncrotron 42

Figura 3: A nova blindagem de concreto da fonte de luz síncrotron em Janeiro de 2005..... 43

Figura 4: Um dos novos kickers de injeção do anel UVX..... 45

Figura 5: Dispositivo wiggler multipolar híbrido de 2 T na bancada de caracterização no Laboratório de Ímãs 46

SUMÁRIO EXECUTIVO

O **Relatório Anual 2004 da ABTLuS** apresenta os resultados técnicos-científicos e de gestão da Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron, Organização Social que opera o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), mediante Contrato de Gestão assinado com o Ministério da Ciência e Tecnologia e o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Apresenta-se, a seguir, o Sumário Executivo do Relatório Anual 2004.

Fonte de Luz Síncrotron

Em 2004 foram fornecidas a usuários da fonte de luz síncrotron 3.514 horas de feixe, sendo 3.464 horas em turnos programados e 50 horas em turnos extraordinários. Estes números correspondem a 92% do valor pactuado no Contrato de Gestão (3.800 horas). Este valor inferior foi ocasionado pela parada emergencial de três semanas em junho, que foi necessária para completar o comissionamento do anel após as melhorias realizadas no sistema de Radiofrequência (RF) na parada do final do ano de 2003. A confiabilidade atingiu 93%, valor pactuado pelo Contrato de Gestão e que já incluía a expectativa das dificuldades encontradas com as mudanças realizadas no final de 2003.

Pesquisas com Luz Síncrotron

Doze linhas de luz foram mantidas em operação em 2004. Nestas linhas de luz (instrumentação científica onde se fazem experimentos com aplicação de Raios-X e Ultravioleta emitidos pela fonte de luz) foram realizadas 379 propostas de pesquisa, originadas de grupos científicos do Brasil (323 propostas), Argentina (41), México (3), África do Sul (2), Uruguai (2), Alemanha (1), Chile (1), Cuba (1), Estados Unidos da América (1), França (1), Noruega (1), Peru (1) e Portugal (1). Em termos de área de pesquisa, esses projetos foram classificados em Biologia Molecular Estrutural (84), Física da Matéria Condensada (76), Ciência dos Materiais (60), Físico-química (40), Física Atômica e Molecular (23), Física Aplicada (23), Biofísica (16), Engenharia de Materiais (11), Ciências do Meio Ambiente (9), Química Analítica (8), Química Inorgânica (8), Bioquímica (7), Geoquímica (6), Física Geral (5), Instrumentação (1), Espectroscopia (1), Engenharia Química (1). A instalação da linha de espalhamento de raios-X a baixos ângulos II foi praticamente concluída, com seu comissionamento previsto para iniciar no primeiro semestre de 2005. As linhas de luz de fluorescência no visível para aplicações em biologia, a de absorção de raios-X II e a de cristalografia de proteínas por técnica MAD encontram-se em construção e tem sua instalação prevista para 2005.

Biologia Molecular Estrutural

Em 2004, o espectrômetro de ressonância magnética nuclear de 600 MHz passou por um período longo de manutenção devido a problemas no magneto, que foi trocado. Os espectrômetros de massas começaram a ser utilizados como instalação aberta e também integrados na rede de proteoma FINEP/FAPESP. Estes equipamentos permitem o sequenciamento de proteínas *ab initio* e podem também ser utilizados para caracterizar proteínas isoladas e para caracterizar o proteoma de microorganismos ou de tecidos ou órgãos de organismos multicelulares. A utilização como instalação aberta considera todas estas aplicações. A Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo (SmolBnet) - iniciada no segundo semestre de 2001, com apoio da FAPESP – continuou seus trabalhos, com o LNLS atendendo 31 pesquisadores. Em 2004, a SmolBNet passou por uma avaliação internacional promovida pela FAPESP, que recomendou sua continuação por mais dois anos. A Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural (coordenada pelo CEBIME/LNLS e CNRMN/UFRJ) tiveram suas atividades intensificadas, tendo o LNLS atendido 13 pesquisadores.

Micro e Nanotecnologia

No Laboratório de Microscopia Eletrônica, onde estão localizados três microscópios eletrônicos - desde 1999 abertos a uso externo - foram realizadas 150 propostas de pesquisa em 2004 (das quais 134 de grupos externos e 16 de grupos internos). Equipamentos obtidos sob regime de comodato junto à Fundação CPqD foram instalados no *campus* do LNLS, formando um laboratório de filmes finos, voltados para atividades de pesquisa e desenvolvimento tecnológico. 18 grupos de pesquisa desenvolveram projetos nestes laboratórios em 2004. Dois outros microscópios (de força atômica e de tunelamento) compõem a infra-estrutura aberta a usuários externos, a partir de 2004, institucionalizando procedimento já realizado em 2003, tendo realizado 20 projetos (16 externos). Foi aprovado na FAPESP um projeto para a ampliação do Laboratório de Microscopia Eletrônica, prevendo a aquisição de dois microscópios eletrônicos de transmissão, sendo um com capacidade para espectroscopia por perda de energia de elétrons.

Aceleradores

Foi concluído o comissionamento do novo sistema de RF, o que permitirá a instalação dos dispositivos de inserção. O *wiggler* (primeiro dispositivo de inserção a ser instalado no LNLS) foi caracterizado e a câmara de vácuo foi instalada na parada de final de ano, com a instalação do *wiggler* propriamente dito prevista para fevereiro de 2005. O protótipo do ondulador começou a ser montado, após um atraso devido a problemas do fornecedor na caracterização dos blocos magnéticos. Após a definição do projeto, iniciou-se a blindagem do anel de armazenamento, a qual está em estágio avançado, devendo ser concluída no primeiro semestre de 2005. Foi concluída a linha de luz DFX de diagnóstico de feixe de raios-X que permitirá desenvolver instrumentação, visando uma melhor estabilidade do feixe para os usuários. Finalmente foram instalados os novos *kickers* - ímãs pulsados com núcleo de ferrite e câmara cerâmica - completando o “upgrade” do sistema de

vácuo do anel, necessário para permitir a operação em altas correntes com segurança.

Transferência de Tecnologia

Em 2004 foram intensificados os esforços na interação com o setor industrial. Dois projetos continuaram suas pesquisas, com a GETEC e com a HP. O projeto da GETEC envolve a caracterização e melhorias em catalisadores de Ni-Al, tendo sido ampliado para o desenvolvimento prospectivo de novos catalisadores baseados em nanoestruturas. O projeto com a HP visa o desenvolvimento de estruturas quânticas de semicondutores com o objetivo de aplicações em dispositivos a base de efeitos quânticos. Além destes, foram iniciados projetos com a companhia D&L Welding Fumes Analysis, com o objetivo de desenvolver técnicas avançadas para o estudo e caracterização de fumos – subproduto de soldagem; com a Bosch Brasil, para o desenvolvimento de processos de brasagem para a produção de linhas de combustível de alta pressão; com a Novocell, para o processamento e caracterização de grafite nanoestruturado para a construção de placas para células combustível a base de grafite; e com a OXITENO SA, para a caracterização de catalisadores.

Informação, Educação e Divulgação

Em 2004 foi contratado o sub-projeto “organização virtual” no âmbito do Projeto GIGA/RNP/FINEP, em parceria com o Laboratório Nacional de Computação Científica. Foram publicados 177 artigos científicos indexados, sendo que 75 com a participação de pesquisadores do LNLS. Foram realizados 12 cursos de treinamento nas técnicas do LNLS, sendo que 3 cursos ocorreram em instituições acadêmicas externas, dentro do programa de ampliar o alcance nacional do LNLS. Foi publicada a edição anual do *Activity Report* (referente ao ano 2003), o qual contou com uma seção sobre as instalações do LNLS e outra sobre os destaques científicos do ano.

Gestão

Foi assinado o 11º Termo Aditivo do Contrato de Gestão, estabelecendo um orçamento de R\$ 21,4 milhões, que foram executados quase integralmente no ano, exceto por R\$ 855 mil que ficaram como restos a pagar. As responsabilidades de prestação de contas previstas no Contrato de Gestão relativas ao ano de 2003 foram cumpridas integralmente. A Controladoria Geral da União, em abril de 2004, concluiu os trabalhos de auditoria, atestando a regularidade com ressalvas das contas da ABTLuS. Os recursos totais movimentados no ano foram de R\$ 36,2 milhões, dos quais 62% tiveram origem no Contrato de Gestão e 38% vieram de outras receitas (agências de fomento, venda de serviços, Fundos Setoriais e bolsas). Mesmo num ano caracterizado por dificuldades técnicas, logrou-se alcançar resultados positivos na maioria dos dezenove indicadores de desempenho pactuados em Termo Aditivo do Contrato de Gestão para o período de janeiro a dezembro de 2004, conforme está demonstrado no Relatório Anual.

1. P, D & I com Luz Síncrotron

1.1 – Fonte de Luz Síncrotron

A operação da Fonte de Luz Síncrotron no ano de 2004 foi marcada pelos preparativos para a instalação da nova blindagem do anel de armazenamento e pelo término do comissionamento do novo sistema de radiofrequência (RF) do anel. No último trimestre de 2004 foi programada uma parada da fonte de luz para a instalação de novos componentes no anel UVX e da nova blindagem. Foram instalados três novos *kickers* (ímãs pulsados utilizados no processo de injeção) e a câmara de vácuo do dispositivo *wiggler*, o qual será instalado em fevereiro de 2005. As instalações desses novos componentes implicaram na ventilação de trechos da câmara de vácuo do anel UVX e deverão ter impacto sobre o tempo de vida nos primeiros meses de operação do próximo ano.

A nova blindagem é formada por um túnel de concreto que envolve todo o anel de armazenamento e deverá permitir que as instalações do prédio do anel sejam utilizadas mesmo durante o processo de injeção. Ao longo de todo o ano foram programadas paradas semanais para preparar o centro do anel para a instalação da estrutura metálica do túnel. A instalação efetiva da nova blindagem teve início em outubro de 2004 e deverá estar concluída até o final de Fevereiro de 2005.

No final de 2003 uma segunda cavidade aceleradora e uma nova estação de potência foram incorporados ao sistema de RF do anel, acompanhados de um completo remodelamento dos circuitos de baixa e alta potência de RF e dos circuitos de controle. O sistema foi comissionado ao longo do primeiro semestre de 2004, o comissionamento do sistema se iniciou no final de 2003 e foi completado no 1º semestre de 2004. Neste período de transição (janeiro à maio de 2004), a fonte de luz síncrotron operou para usuários com apenas uma cavidade (a antiga) alimentada com potência e o anel apresentou problemas com a estabilidade do feixe, que foram diagnosticados como sendo relacionados com a excitação de modos ressonantes na nova cavidade de RF. Essas instabilidades foram em parte responsáveis pela sensibilidade do feixe a flutuações na rede elétrica, o que representou um aumento de 60% no número médio de quedas de feixe durante os turnos de usuários com relação ao mesmo período de 2003. Além disso houve uma piora na qualidade do feixe, uma vez que essas instabilidades resultaram em flutuações no fluxo de fótons que puderam ser observadas em algumas linhas de luz. Para que o problema fosse solucionado, uma parada emergencial foi realizada em junho. Três semanas de operação do mês de junho, além de uma semana já previamente programada como parada, foram re-programadas para estudos de máquina. O tempo de feixe para usuários foi parcialmente reposto com a operação da fonte de luz síncrotron aos sábados durante o segundo semestre. Com a parada emergencial foi possível resolver o problema da instabilidade e colocar em operação a segunda cavidade de RF. Obteve-se também uma nítida melhora na qualidade do feixe e um aumento significativo do tempo de vida, o que permitiu a operação para os usuários com apenas uma injeção por dia durante todo o segundo semestre de 2004.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Foram fornecidas 3.514 horas de feixe para usuários, sendo 3.464 horas durante turnos programados e 50 horas em turnos extraordinários (Tabela 1 e Tabela 2), ficando aquém das 3.747 horas programadas para o ano. Neste período, foram registradas 283 horas de falhas durante o horário programado, resultando num índice de confiabilidade de 92,7%, próximo do índice de 93% pactuado para este ano. A causa principal da queda de confiabilidade da fonte frente aos 98% registrados em 2003 foram os problemas de instabilidade resultantes da instalação da segunda cavidade de RF, observados no primeiro semestre de 2004 e que estavam previstos quando da pactuação dos indicadores.

A operação no modo *single-bunch* (ou modo de operação em pacote único), em que apenas um entre 148 possíveis pacotes de elétrons são efetivamente preenchidos, foi realizada nas duas últimas semanas de setembro. Uma nova versão do eliminador de pacotes para operação *single-bunch* foi construída, com objetivo de atingir uma maior pureza nesse modo de operação. Além disso, um novo sistema de detecção de corrente por pacote, baseado em uma foto-multiplicadora rápida, foi desenvolvido e testado, permitindo observar pureza melhor que 1 parte em 1000.

Uma nova linha de luz para diagnóstico do feixe de elétrons (DFX) que utiliza a radiação síncrotron emitida no espectro de raios-X foi instalada em 2004. Essa linha será utilizada para estudos do feixe de elétrons e para o desenvolvimento de instrumentação científica. Um protótipo de monitor de posição de raios-X foi desenvolvido e a eletrônica para aquisição e processamento dos sinais desse monitor está em fase avançada de projeto. Ele foi instalado na linha DFX e encontra-se em fase de testes. Esses monitores serão uma ferramenta importante para medir a estabilidade da órbita nas linhas de luz.

Como já mencionado, e em consequência das melhorias obtidas durante a parada emergencial, observamos um aumento significativo do tempo de vida médio do feixe de elétrons que passou de 12 para 16 horas, decorrente do aumento na tensão de aceleração, possibilitada pela instalação da nova cavidade e pelo uso da modulação em fase. Esse aumento do tempo de vida médio ocasionou um aumento de 10% na corrente média armazenada durante os turnos, com impacto favorável sobre o indicador de Desempenho.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Os parâmetros de desempenho do feixe podem ser observados na Tabela 1:

Parâmetros de Desempenho Operacional da Fonte de Luz Síncrotron em 2004															
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun*	Jul	Ago	Set	Set SB	Out	Nov	Dez	Media Tot	
Corrente Inicial Média	247	241	248	239	243	250	258	270	267	10	-	-	-	252	mA
Corrente Média	169	169	177	172	171	182	166	180	165	4	-	-	-	172	mA
Tempo de Vida Médio	14,9	16,1	15,9	16,4	16,7	17,5	18,3	19,1	20,7	12,4	-	-	-	17	h
Corrente Integrada	63,6	48,5	88,4	57,3	71,2	11,4	101,4	80,5	38,3	1,0	-	-	-	562	A.h
Tempo de Feixe Programado	414	301	522	391	468	62	630	470	243	248	-	-	-	3747	h
Tempo de Feixe durante o horário programado	374	284	495	332	392	61	606	444	233	243	-	-	-	3464	h
Tempo Total de Feixe	377	287	499	334	416	62	609	446	233	251	-	-	-	3514	h
Confiabilidade	90,3	94,6	95,0	84,8	83,9	99,1	96,1	94,5	96,0	97,9	-	-	-	92,7	%
Desempenho	107,1	107,7	111,3	108,7	109,3	115,0	111,5	118,8	114,7	ND	-	-	-	111,4	%

Tabela 1: Parâmetros de desempenho da fonte de luz síncrotron em 2004.

(*) As atividades do mês de junho foram reprogramadas para o segundo semestre para que fossem solucionados os problemas de instabilidade do feixe de elétrons. A operação normal para usuários foi retomada a partir de 28 de junho. Os dados constantes da Tabela para o mês de junho são referentes a apenas 3 dias de feixe.

Devido à mudança de programação foi fornecido menos tempo de feixe do que o inicialmente programado para o ano. Apesar da reprogramação e operação aos sábados no segundo semestre a compensação do tempo despendido na parada de junho foi apenas parcial.

Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2004															
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun*	Jul	Ago	Set	Set SB	Out	Nov	Dez	Total	
Usuários	377	287	499	334	416	62	609	446	233	251	-	-	-	3514	
Injeção	18	20	19	21	16	2	16	10	8	8	-	-	-	138	
Estudos de Máquina	228	266	190	277	236	637	76	195	77	12	32	42	47	2317	
Manutenção	0	52	0	28	0	17	17	38	37	36	340	105	82	752	
Comissionamento	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	341	573	263	1177	
Máquina Desligada	81	54	10	0	0	1	2	29	20	24	31	0	352	603	
Falha	40	16	26	59	75	1	24	26	10	5	0	0	0	283	
Total	744	696	744	720	744	720	744	744	384	336	744	720	744	8784	
Grau de Saturação	89%	92%	99%	100%	100%	100%	100%	96%	95%	93%	96%	100%	53%	93%	
Número de Dias	31	29	31	30	31	30	31	31	16	14	31	30	31	366	

Tabela 2: Uso da fonte de luz síncrotron em 2004.

(*) O mês de junho considera a reprogramação devido à parada emergencial.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

O alto grau de saturação é um reflexo do esforço dispendido no estudo e solução dos problemas de instabilidade do feixe observados ao longo do semestre.

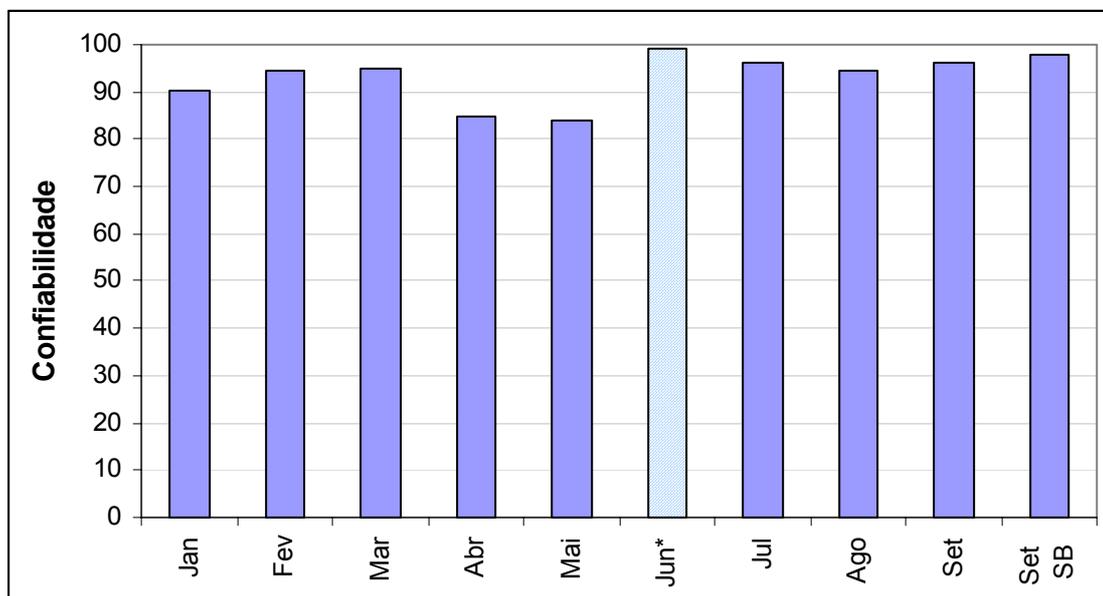


Gráfico 1: Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em operação para usuários em 2004.

()A alta confiabilidade do mês de Junho é referente apenas aos três dias de operação após a parada emergencial destinada a solucionar os problemas com o feixe, sendo já um reflexo das intervenções realizadas.*

A baixa confiabilidade durante alguns meses do primeiro semestre foram decorrentes dos problemas de instabilidade do feixe.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

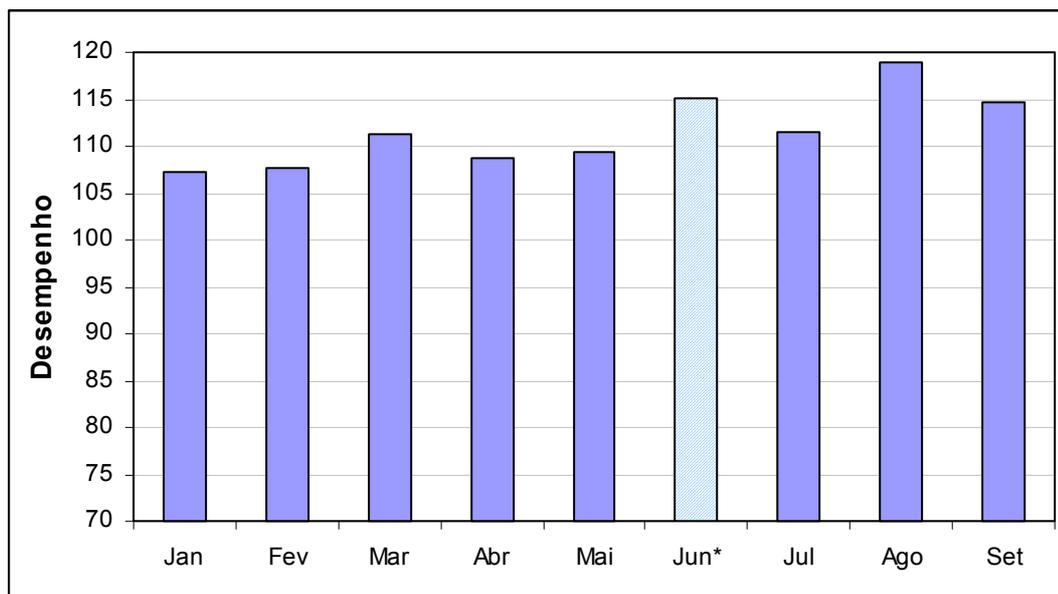


Gráfico 2: Desempenho da fonte de luz síncrotron durante a operação para usuários. O mês de junho refere-se apenas aos 3 dias de feixe realizados após a parada emergencial. Setembro não inclui a operação no modo Single-Bunch.

O desempenho obtido em 2004 é uma consequência de um aumento considerável do tempo de vida e da corrente média do anel, decorrentes das modificações efetuadas no sistema de RF. O indicador de Desempenho não reflete os efeitos negativos causados pelas instabilidades do feixe, que tiveram impacto considerável sobre o número de horas de estudos de máquina (ver Tabela 2.)

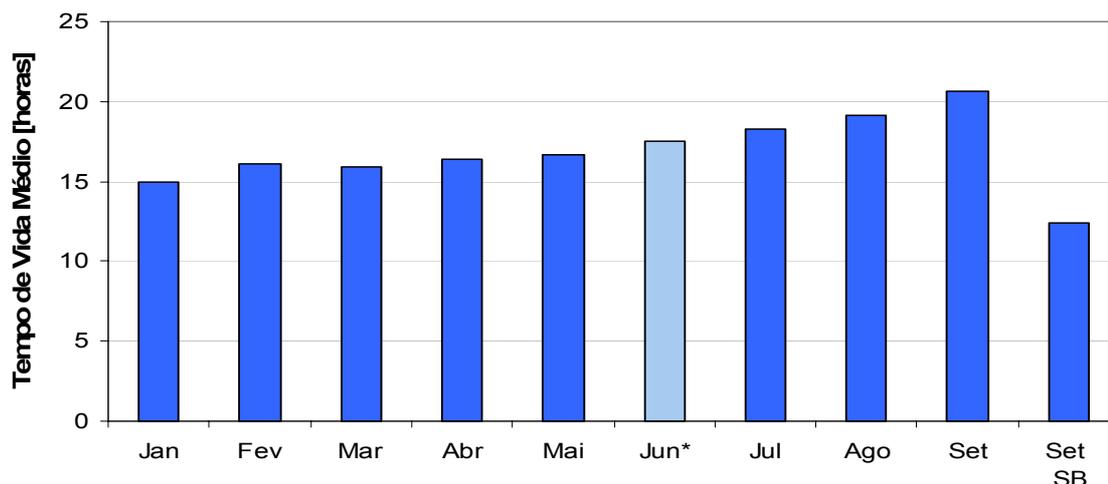


Gráfico 3: Tempo de vida médio do feixe em operação para usuários em 2004. (*) O mês de junho refere-se apenas aos 3 dias de feixe realizados após a parada emergencial.

A partir do mês de junho, após correções introduzidas durante a parada emergencial, a fonte de luz síncrotron passou a operar com duas cavidades de RF e com uma tensão de aceleração maior. Como consequência obteve-se um aumento do tempo de vida médio do feixe.

1.2– Manutenção das Linhas de Luz

Doze linhas de luz foram mantidas em operação durante o ano de 2004. A nova linha de luz de difração de raios-X em policristais (linha do dipolo D10B:XPB) entrou em operação no primeiro semestre com a realização de 25 propostas de pesquisa que foram transferidas das linhas D12A:XRD1 e D10A:XRD2.

Neste ano, aproveitando a parada do anel de outubro até dezembro, todas as linhas passaram por serviços de manutenção que variaram desde a limpeza e/ou troca de cristal do monocromador (D03B:CPR e D10B:XPB) e manutenção de detectores (D03B:CPR e D10A:D2), até o re-espelhamento ou limpeza de espelhos de focalização (D04A:SXS e D08A:SGM). Nas linhas (D03B:CPR, D09B:XRF, D11A:SAS) foi feita a instalação de uma janela de Berílio refrigerada de 125 μm no módulo de fendas pré-monocromador visando adaptação às novas condições de operação de anel (maior fluxo). Neste ano a linha D11A:XAS, em particular, passou por um total recomissionamento para se ajustar às condições de operação após redução do comprimento da linha em julho 2003. A linha D11A:SAS também passou por diversas operações de manutenção nos sistemas de vácuo, componentes mecânicos e componentes eletrônicos.

1.3– Melhoramentos nas Linhas de Luz

Uma das melhorias que beneficiará indiretamente todas as linhas, e em particular as linhas D04A:SXS, D06A:DXAS e D08A:SGM, foi a criação de um laboratório de apoio de magnetismo inteiramente automatizado que tem por principal finalidade a caracterização rápida das propriedades magnéticas de filmes finos. O laboratório conta com um magnetômetro baseado em efeito *Kerr* e efeito *Hall* extraordinário e atinge campos magnéticos de até 1 Tesla com alta sensibilidade. Este sistema permite analisar amostras em função do eixo de anisotropia e tem a possibilidade de se acoplar a um criostato de 15 à 400 K.

Durante este ano foram realizadas diversas melhorias nas linhas de luz em operação ,que serão descritas a seguir:

D03B: Cristalografia de Proteínas (MX1)

Esta linha possui um monocromador de **Cristal único curvo** de silício e está otimizada para operar na faixa de energia de **6 - 12 keV**. Suas principais aplicações são em biologia molecular estrutural para elucidar a estrutura cristalográfica de proteínas. A principal melhoria nesta linha foi a instalação de um filtro de grafite com o objetivo de reduzir a carga térmica no monocromador e aumentar a estabilidade do feixe monocromático que incide na amostra.

D04A: Espectroscopia de Raios-X Moles (XAS1)

Com um monocromador de **duplo cristal** esta linha está otimizada para operar na faixa de energia de **0,8 - 4 keV**. A principal técnica experimental explorada nesta linha é a de espectroscopia de fotoabsorção e fotoemissão de elétrons. Dentre as melhorias realizadas em 2004 tivemos a substituição da camada de ouro dos espelhos por uma de ródio visando o aumento da energia máxima de operação da linha em alto fluxo de 2 para 3 keV. Também foi instalado um novo monocromador de quartzo que permitirá a realização de novos experimentos onde é necessário o acesso à borda K de absorção do alumínio. Como um adendo que deverá aumentar a disponibilidade desta linha para usuários, foi colocado em operação um tubo de raios X convencional para caracterização de amostras pela técnica de fotoemissão. Assim, a estação experimental acoplada a esta linha de luz poderá ser utilizada também em experimentos específicos onde não é necessário empregar o espectro contínuo da fonte de luz síncrotron.

D04B: Espectroscopia de Absorção de Raios-X (XAS)

Esta linha possui um monocromador de **cristal sulcado** e está otimizada para operar na faixa de energia de **3 - 24 keV**. A técnica experimental mais explorada é a de espectroscopia de fotoabsorção, e suas principais aplicações são no estudo de materiais como filmes finos, óxidos e sistemas diluídos. Algumas das principais melhorias realizadas em 2004 visaram o acondicionamento das amostras em diversas situações. Um forno cilíndrico de 1000 C foi instalado e vários porta-amostras foram construídos: porta amostras de cerâmica, para pastilhas e filmes utilizados em experimentos *in situ* no forno cilíndrico, um porta amostra para amostras líquidas, para uso em temperaturas desde a temperatura ambiente até 100 C, e um porta amostras com posicionamento angular adaptado a uma câmara de vácuo para medidas em baixa energia (4 keV) por transmissão e/ou fluorescência. Neste ano também iniciou-se o desenvolvimento de uma célula de nitreto de boro pirolítico para experimentos com amostras líquidas em altas temperaturas. Foi também instalada uma linha de N₂ gasoso que terá diversas aplicações em vácuo, eletroquímica e detectores. Por fim foi instalado um sistema de filtros para a câmara CCD de detecção, controlados remotamente por acionadores pneumáticos.

D05A: Espectroscopia de Ultra Violeta (TGM)

Esta linha possui um monocromador de **grade toroidal** e está otimizada para operar na faixa de energia de **12 – 330 eV**. As principais aplicações desta linha estão no estudo de átomos, moléculas e superfícies através da técnica de espectroscopia de tempo de voo e eletrônica. Em 2004 foram feitas diversas melhorias para aumentar a estabilidade e a qualidade do feixe de ultra violeta fornecido aos usuários. Dentre elas estão a refrigeração do primeiro espelho acoplado à linha de luz, a introdução de um filtro de harmônicos e a implementação de uma nova fenda que vai permitir selecionar a polarização elíptica da luz. Além disso, foram construídas plataformas para acoplamento de 4 novas estações experimentais à linha de luz e uma nova estação experimental para caracterização (em nível molecular e atômico) de superfícies e multi-camadas congeladas através de técnicas como *plasma desorption mass spectroscopy*, *alfa partial atomic thickness monitoring*, *quadrupole mass spectroscopy* ou *multicoincidence time of flight spectroscopy*. Para experimentos com átomos de cálcio ultra-frios, foi construído um espectrômetro para medidas de efeitos não dipolares e foram desenvolvidos novos sistemas para resfriamento e aprisionamento em melaço ótico de átomos de cálcio.

D06A: Absorção de Raios-X dispersivos (DXAS)

O monocromador desta linha é um **crystal único focalizante** e ela está otimizada para operar na faixa de energia de **4 – 12 keV**. Suas principais aplicações estão na ciência dos materiais, estudos *in-situ* e dicroísmo magnético. Algumas das principais melhorias realizadas neste ano visaram o acondicionamento das amostras em diversas situações. Foram implementados um forno capilar para experimentos de catálise operando em uma faixa de temperatura de até 500 C e uma célula de pressão, que permitirá trabalhar com amostras em pressões de até 2 GP.

D06B: Litografia de Raios-X (XRL)

Esta linha trabalha com **feixe branco filtrado** e está otimizada para operar na faixa de energia de **5 – 20 keV**. A principal aplicação desta linha é a litografia profunda de raios-X. Não foram realizadas melhorias neste ano.

D08A: Espectroscopia de Raios-X Moles e Ultra-Violeta (SGM)

Esta linha possui um monocromador de **grade esférica** e está otimizada para operar na faixa de energia de **0,3 – 1 keV**. A análise de superfícies e interfaces e física atômica e molecular são algumas das suas principais aplicações. Em 2004 foram feitas diversas melhorias no sentido de aumentar a estabilidade e a qualidade do feixe de fótons fornecido aos usuários. Dentre elas se destacam as melhorias nos sistemas de vácuo das câmaras de análise acopladas à linha para garantir que os espelhos não sejam contaminados, instalação de um sistema de resfriamento do primeiro espelho, troca do limitador de feixe antes do primeiro espelho e a instalação de nova fenda para a escolha do tipo de polarização: linear ou circular.

D09B: Fluorescência de Raios-X (XRF)

Esta linha opera com radiação monocromatizada por um **duplo-cristal tipo channel-cut ou com feixe branco** e está otimizada para operar na faixa de energia de **4 – 24 keV**. As principais aplicações desta linha estão em física atômica e molecular, química analítica, meio-ambiente e geoquímica, biofísica e agricultura. Em 2004 foi instalado um “olho de raios-X” que permitirá um melhor monitoramento e alinhamento do feixe de fótons. Foram também desenvolvidos um porta amostras adaptado para medidas em condições de ângulos rasantes em experimentos de TXRF e um porta amostras para câmara de vácuo com um sistema que poderá controlar até 6 (seis) amostras dentro da câmara. Além disso, as melhorias feitas neste ano no sistema de detecção da linha permitirão detectar traços de elementos mais leves, com número atômico entre $7 < Z < 14$. Para isso foi montado um detector de Germânio hiperpuro (HPGe) com 140 eV de resolução em energia para a linha $K\alpha$ do Mn (5,9 keV). Foram ainda realizadas melhorias no arranjo, sistema de coleta de dados e backup dos computadores da linha.

D10A: Espalhamento e Difração de Raios-X (XRD2)

Esta linha possui um monocromador de **duplo-cristal focalizante** e está otimizada para operar na faixa de energia de **4 – 12 keV**. As técnicas mais utilizadas são a difração de mono cristais, difração magnética e difração em incidência rasante. Em 2004 foram feitas diversas melhorias no controle da linha. Primeiro, a aquisição de um microcomputador industrial permitindo o aumento do número de canais de comunicação com dispositivos de automação da linha. Foram instalados novos dispositivos automáticos de atenuadores de intensidade de raios-X e de automação no ajuste de altura da amostra no difratômetro. A implementação da refrigeração dos “lábios” das fendas de feixe branco, a instalação do novo obturador de feixe monocromático bem como a instalação dos módulos eletrônicos de monitoração da abertura e a posição das fendas dos feixes branco e monocromático, visaram uma melhoria na qualidade e maior controle sobre o feixe de fótons fornecido aos usuários. Dentre as melhorias relacionadas diretamente à otimização e montagem de novos experimentos, tivemos a implementação do sistema que integra o controle dos *drivers* de motores, detector CCD e obturador, utilizados em experimentos de radiografia, a aquisição de quatro sensores de diodo de silício para controle e monitoramento da temperatura da amostra no criostato, instalação de motor de alto torque para o movimento teta e construção de novo sistema de fixação para os cristais do polarímetro que permite a resolução em polarização do feixe espalhado, fundamental para análise da difração magnética de raios-X e a construção do protótipo que deverá permitir medidas de espalhamento de raios-X a baixo ângulo em geometria de incidência rasante.

D10B: Difração de Raios-X em policristais (XPD)

O monocromador nesta linha é um **duplo-cristal focalizante** e está otimizado para operar na faixa de energia de **4 – 15 keV**. O estudo estrutural por difração em policristais é a principal aplicação desta linha. Após o início de operação para usuários, ela passou por várias otimizações resultantes de estudos de performance. Houve um levantamento de toda a linha para aumentar sua aceitação angular de 3,5 mrad para 4,5 mrad que resultou no aumento do fluxo de fótons na região abaixo de 14 keV. Iniciou-se também a redação de um manual da linha que, em breve, será disponibilizado aos usuários (também na internet). Nos sistemas de detecção dos fótons espalhados, foram adquiridos um cristal analisador de grafite, que será utilizado em medidas onde deseja-se manter um bom compromisso entre intensidade e resolução, e um detector linear sensível à posição para medidas *in situ*. Também foi projetado um sistema de detecção por placas de imagem (*image plate*) motorizado, que será construído no segundo semestre, e que será acoplado a um forno para medidas da cinética de transformações de fase. Para melhorar a automação da linha, os controladores de temperatura do criostato e do forno foram integrados ao programa (SPEC) que controla os motores do monocromador e do difratômetro na coleta de dados.

D11A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo (SAXS1)

Esta linha possui um monocromador de **cristal único focalizante** e está otimizada para operar na faixa de energia de **4 – 12 keV**. Algumas de suas principais aplicações são o estudo de vidros, nanomateriais, polímeros e biologia molecular. Algumas das principais melhorias realizadas em 2004 visaram o controle de acondicionamento das amostras. Foi projetado e caracterizado um novo forno de alta temperatura que permite registro sincronizado da temperatura na posição da amostra e controle remoto das exposições usando placas de imagem ou detectores a gás. Também foram implementados novos porta amostras para líquidos com capilares que deverão aumentar a autonomia do sistema. Para permitir o aquecimento de amostras por circulação com o banho Lauda foram feitas adaptações do sistema de circulação em diferentes porta amostras e foi implementado e testado um novo isolamento térmico. Por fim, todos os porta amostras (DSC, Teflon, capilar, mica, tilt) foram adaptados em uma única mesa universal X-Y que teve sua automação de posicionamento e alinhamento incorporada aos programas de controle da linha.

D12A: Difração de Raios-X (XRD1)

Esta linha possui um monocromador de **duplo-cristal focalizante** e está otimizada para operar na faixa de energia de **4 – 12 keV**. Suas principais aplicações são estudos estruturais por difração de monocristais e difração múltipla de raios-X. As principais melhorias realizadas em 2004 visaram otimizar o controle fino de posicionamento da amostra e do monocromador da linha. Foi feita a instalação e automação de *encoders* para monitorar e corrigir perdas no passo dos motores que movimentam a amostra nos chamados eixos *theta* e *xi*. Também foi iniciada a automação do eixo alfa do difratômetro "a" para difração em ângulo rasante que possibilitará obter com precisão o ângulo ideal de incidência do feixe de raios-X sobre a amostra.

1.4 – Implementar Novas Linhas de Luz

As linhas em construção ou em planejamento encontram-se em diferentes estágios de desenvolvimento que descreveremos a seguir.

D02B: linha de diagnóstico de feixe- DFX

Esta linha foi construída como parte de um programa de melhoria da estabilidade do feixe de elétrons, a partir da recomendação do comitê científico internacional. Sua função principal é fornecer informações precisas sobre a estabilidade do feixe, baseadas no monitoramento do raio-x produzido. Os principais componentes desta linha estão descritos no programa 4 (ver Diagnóstico do Feixe: Estabilidade de Órbitas).

W01A: Wiggler multipolar para Cristalografia de Proteínas – MX2

Esta linha irá utilizar o feixe de fótons proveniente do primeiro dispositivo de inserção do anel de armazenamento (*wiggler*) e é a mais sofisticada já projetada pela equipe do LNLS. Ela terá um monocromador de **duplo-cristal focalizante** e estará otimizada para trabalhar na faixa de energia de **6 – 15 keV**. Sua principal aplicação é em biologia molecular estrutural usando a técnica MAD (Difração Anômala a Múltiplos Comprimentos de Onda). Em novembro de 2004 a câmara de vácuo do *wiggler* foi instalada e o dispositivo de inserção propriamente dito será instalado no anel de armazenamento em fevereiro de 2005. Uma fração considerável dos componentes da linha já foram comprados ou produzidos no LNLS e várias análises sobre o comportamento térmico dos componentes diante da grande carga térmica a que serão submetidos foram realizadas. As especificações dos espelhos de focalização foram concluídas e o pedido de compra finalizado em setembro de 2004, com previsão de entrega em maio de 2005. O "*front-end*" da linha foi instalado em novembro-dezembro de 2004. Outros elementos como câmaras de vácuo dos espelhos, monocromador e os módulos de fendas já foram construídos ou estão em fase final de construção. Destacamos dois componentes projetados: o novo monocromador, com um novo sistema de translação do segundo cristal baseado em sistema elástico monobloco e o filtro de carbono, fundamental para redução da carga térmica sobre os demais componentes.

O planejamento é de finalização da montagem da linha no primeiro semestre de 2005 e comissionamento no segundo semestre de 2005. Esta linha e o *wiggler* foram financiados pela FAPESP.

D02A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo 2- SAX2

Esta linha possui um monocromador de **cristal único focalizante** e estará otimizada para operar na faixa de energia de **6 – 12 keV**. Assim como a outra linha de espalhamento a baixo ângulo, suas principais aplicações são no estudo de vidros e nanocristais, polímeros, biologia molecular. Sua construção se iniciou em 2003 e deveria ter sido completada em 2004, mas problemas com as janelas de Berílio importadas atrasaram o cronograma. A janela de Berílio, prevista para a linha, não resistiu à pressão atmosférica e se rompeu durante o processo de bombeamento

para vácuo do monocromador. Novas janelas foram encomendadas, mas com previsão de chegada apenas em janeiro de 2005. A linha encontra-se em fase final de montagem. Os principais componentes ópticos foram instalados (espelho e monocromador). Fendas, filtros, *beamstop*, mesas transladoras e caminhos de vácuo estão já posicionados sobre o banco óptico prontos para o comissionamento da linha. Foram realizados testes gerais da mecânica e da eletrônica dos componentes instalados e realizadas as modificações necessárias. Esta linha foi financiada pela ABTLuS.



Figura 1: Linha SAXS2 aguardando últimos componentes. O berço porta amostra tem 5 m de comprimento e é feito inteiramente em alumínio estrutural.

D05B: Fluorescência UV para biologia -VUVF

Esta linha estará otimizada para operar na faixa de energias de 1,7 – 6,2 eV. Ela utilizará radiação na faixa do ultra-violeta com uso de técnicas de fluorescência em Biologia e Química. A linha consiste basicamente de uma câmara “Z”, onde estão instalados os dois espelhos e na qual a luz ultravioleta descreve uma trajetória similar à letra Z, e da mesa onde é instalado o espectrômetro. Na câmara “Z” os espelhos são posicionados de tal forma a refletirem a parte visível e ultravioleta do espectro emitido pelo anel e absorver os raios-X. Apesar dos componentes já estarem prontos desde março de 2004, os espelhos atrasaram quase 8 meses e só foram entregues no final do ano. O comissionamento será feito no primeiro semestre de 2005. Esta linha de luz foi financiada por projeto da FAPESP.

D08B: Espectroscopia de Absorção de Raios -X - 2- XAS2

Esta segunda linha de absorção de raios-X possui um monocromador de **duplo-cristal focalizante** e estará otimizada para operar na faixa de energia de **4 - 15 keV**. A técnica experimental mais explorada também será a de espectroscopia de fotoabsorção, e suas principais aplicações são no estudo de materiais como filmes finos, óxidos e sistemas diluídos. Esta deverá ter um fluxo dez vezes maior do que a linha I e está sendo projetada. Foram feitas simulações de possíveis configurações e diversos testes de instrumentação. Também foram realizados testes de viabilidade do uso de monocromatização sagital (realizados na linha XRD-1). Os testes levaram à opção por uma configuração com 2 espelhos, cilíndrico (colimação meridional, antes do monocromador) e toroidal (com focalização sagital e meridional). No segundo semestre, foram definidas as especificações finais dos espelhos. O projeto da mecânica do monocromador foi finalizado e está em fase inicial de testes. A montagem e comissionamento da linha estão previstos para o primeiro e segundo semestre de 2005, respectivamente. A linha está financiada pelo projeto CT-Infra III.

U11: Ondulador para Espectroscopia VUV de alta resolução

Esta linha possui um monocromador de **grade plana** e estará otimizada para operar na faixa de energias de 0,1 – 1,2 keV. Suas principais aplicações são o estudo de superfícies e interfaces; física atômica e molecular e dicroísmo circular magnético. Ela se encontra ainda em fase final de definição do projeto. Os recursos para a construção desta linha foram obtidos parcialmente através de projeto Pronex/FAPESP. Os recursos necessários para o ondulador foram obtidos através dos projetos CT-Infra I e III.

1.5 – Uso das Linhas de Luz

Durante o ano de 2004 foram realizadas 379 propostas de pesquisas, por mais de 740 pesquisadores usuários (responsáveis e colaboradores) utilizando as instalações das linhas de luz.

A evolução histórica da quantidade de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 2000 e sua distribuição geográfica, pode ser observada na Tabela 3.

Origem	2000		2001		2002		2003		2004	
São Paulo	93	65%	112	62%	138	60%	223	62%	216	57%
Outros estados	28	20%	42	23%	59	26%	82	23%	107	28%
Outros países	21	15%	27	15%	34	14%	53	15%	56	15%
Total	142		181		231		358		379	

Tabela 3: Distribuição geográfica das propostas de pesquisa nas linhas de luz

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

A distribuição das propostas de pesquisas realizadas durante o ano de 2004 por linha de luz pode ser observada na tabela 4.

Linha (2004)	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
Total realizado nas Linhas	67	54	86	19	19	27	16	18	14	34	25	379
Por país:												
Brasil	64	40	70	17	18	26	15	13	11	30	19	323
Outros	3	14	16	2	1	1	1	5	3	4	6	56
Total	67	54	86	19	19	27	16	18	14	34	25	379
Linha (2004)	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
Total realizado nas Linhas	67	54	86	19	19	27	16	18	14	34	25	379
Por país:												
Brasil	64	40	70	17	18	26	15	13	11	30	19	323
Argentina	3	9	11	2		1	1	5	3	4	2	41
México		1	1								1	3
África do Sul											2	2
Alemanha		1										1
Chile			1									1
Cuba											1	1
Estados Unidos da América					1							1
França			1									1
Noruega			1									1
Peru		1										1
Portugal		1	1									2
Uruguay		1										1
Total	67	54	86	19	19	27	16	18	14	34	25	379

Tabela 4: Propostas de pesquisa realizadas nas linhas de luz

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Por instituição brasileira no Estado de São Paulo:	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
São Paulo	59	29	47	8	14	16	6	7	6	15	9	216
UNICAMP	1	8	16	1	10	4		3		8	1	52
LNLS	8	8	3	3		6	6	1	4	1	2	42
USP - São Paulo	9	3	12	2	2	4		2	1		1	36
USP- São Carlos	15	3	6						1	2		27
UNESP - São José Rio Preto	18											18
UNESP - Araraquara		4	6								3	13
UFSCar		3	2	1	2	1						9
UNESP - Botucatu	5											5
USP - Ribeirão Preto	1		1			1				1	1	5
UNIFESP	2											2
USP - CENA										2		2
Centro Pesquisas Odontológicas São Leopoldo Mandic										1		1
Faculdade de Tecnologia SP				1								1
IPEN											1	1
UNESP - Bauru								1				1
Rhodia - Paulínia			1									1
Bahia												4
UESC						1	1					2
UFBA						2						2
Brasília												6
UnB	2			3							1	6
Ceará												5
UFC	3								1		1	5
Espírito Santo												3
UFES									1		2	3
Minas Gerais												13
CDTN							1			1		2
UFMG		2	1	2	1	1		1			2	10
EFOA											1	1
Pará												1
UFPA		1										1
Paraná												4
UEOP										1		1
UFPR					2						1	3
Rio de Janeiro												52
CBPF		2				5			3			10
FIOcruz			3								1	4
IME			4					2				6
PUC - Rio				1			1					2
UERJ										2		2
UFRJ		1	8	1	1	1	5	2		9		28
Rio Grande do Norte												3
UFRN		1		1						1		3
Rio Grande do Sul												12
UFRGS		4	6							1		11
UFSM			1									1
Santa Catarina												4
UFSC				1			1	1			1	4
Total Geral	5	11	23	9	4	10	9	6	5	15	10	323

Propostas realizadas nas linhas de luz (continuação)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Por área de pesquisa :	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPB	Total
Biologia Molecular Estrutural	60		19							1	4	84
Física da Matéria Condensada		19	11	8	15			3	7	1	12	76
Ciência dos Materiais		17	18	6		3		6	4	2	4	60
Físico-química		10	20		1			4	3	1	1	40
Física Atômica e Molecular				1		15	4	1		2		23
Física Aplicada					1	5	10	2		5		23
Biofísica	2		8	1	1					4		16
Engenharia de Materiais			5	3	1						2	11
Ciências do Meio Ambiente			1							8		9
Química Inorgânica		6	1								1	8
Química Analítica										8		8
Bioquímica	5		2									7
Geoquímica		2	1					1		2		6
Física Geral						3	2					5
Instrumentação											1	1
Espectroscopia						1						1
Engenharia Química								1				1
Total da Linha	67	54	86	19	19	27	16	18	14	34	25	379

Propostas de pesquisa nas linhas de luz (continuação)

Das propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz 85% se originaram no Brasil e 15% no Exterior, onde houve preponderância de usuários argentinos.

Foram concedidos 306 auxílios, pelo Programa de Auxílio Financeiro para pesquisadores de instituições brasileiras, para a realização de 101 propostas em 2004, contemplando a totalidade de propostas de outros estados. O programa de Auxílio Financeiro para pesquisadores de Instituições Latino-Americanas e Caribe, concedeu mais de 59 auxílios para a realização de mais de 57% das propostas de pesquisas de outros países nas linhas de luz. A evolução do número de auxílios concedidos pode ser observada no Gráfico 4:

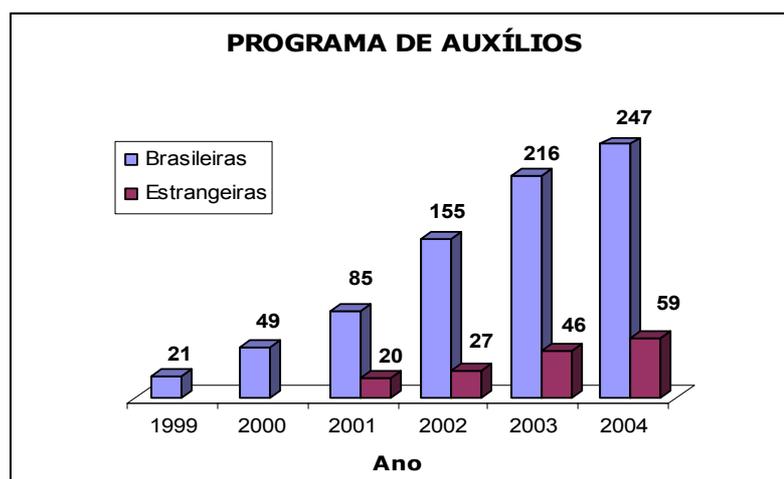


Gráfico 4: Histórico dos auxílios concedidos

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Por fim, o Gráfico 5 apresenta a evolução histórica dos números de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 1998.



Gráfico 5: Evolução do número de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz durante o ano de 2004.

Um resumo dos principais parâmetros de uso e evolução da infraestrutura relacionada a P,D&I com a luz síncrotron pode ser observada na Tabela a seguir:

	2001	2002	2003	2004
Projetos	181	231	358	379
Horas de Linhas	23.420	32.980	40.533	39.909
Confiabilidade	95%	96%	98%	93%
Linhas de Luz em operação	10	10	11	12
Novas Linhas de Luz instaladas ou em instalação	-	1	1	2

Tabela 5: Principais parâmetros de uso da Fonte de Luz Síncrotron

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

A infraestrutura de pesquisa, em micro e nanotecnologias do LNLS esteve composta pelos seguintes laboratórios e/ou grupos:

- Laboratório de Microscopia Eletrônica (LME);
- Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento (MTA);
- Laboratório de Microfabricação (LMF);
- Grupo de Teoria (TEO);
- Lab. de Síntese Química de Nanopartículas (LSQ) e,
- Lab. de Filmes Finos (LFF).

2.1 – Manutenção e Melhoramentos da Infra-estrutura

A infraestrutura de pesquisa em micro e nanotecnologia foi mantida operacional durante todo o ano de 2004.

O Gráfico 6 apresenta as horas de operação dos microscópios eletrônicos. Observa-se que o microscópio de transmissão (TEM) continua apresentando elevado tempo de manutenção (17%), embora inferior ao de 2003 (25%). O microscópio de varredura em baixo vácuo (LV) apresentou um alto tempo de utilização, devido ao aumento da demanda pelos projetos industriais, encontrando-se saturado. O microscópio de varredura por emissão de campo (FEG) aumentou sua utilização e ainda possui tempo disponível. Todos os microscópios apresentaram um significativo aumento no tempo de uso em relação à 2003.

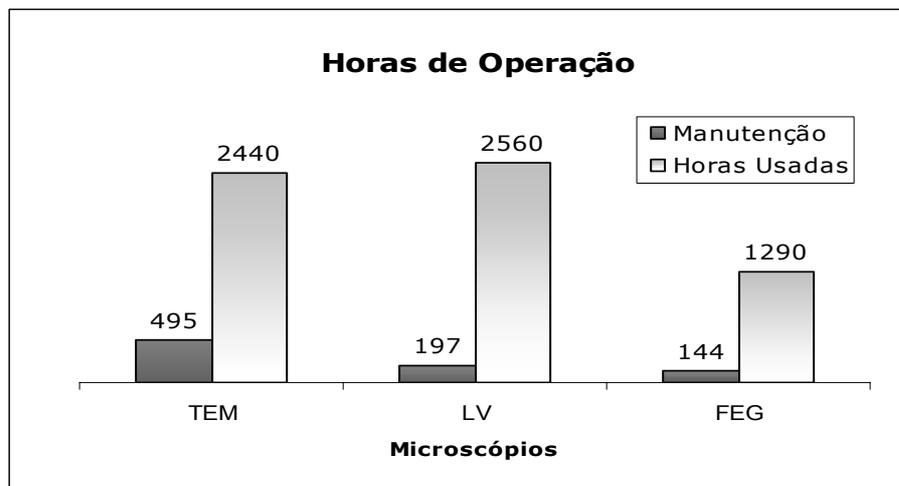


Gráfico 6: Horas de operação dos Microscópios Eletrônicos em 2004

A manutenção dos microscópios eletrônicos foi custeada pelo recurso do convênio aprovado junto à Financiadora de Estudos e Projetos – Finep, edital FNDCT – CT-INFRA de Manutenção V.

Em 2004 foi aprovada pela FAPESP a aquisição de dois novos microscópios eletrônicos de transmissão, sendo um com capacidade para espectroscopia por perda de elétrons (EELS). Foram testados dois tipos de microscópios e um contrato está sendo firmado para a aquisição do novo microscópio. Sua instalação deverá ocorrer em 2005, no prédio de nanociências que está em fase de projeto, com salas especialmente dedicadas para a microscopia.

O Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento (MTA) apresentou vários melhoramentos, entre os quais destaca-se a aquisição de um novo *scanner* de 125 μm para o microscópio de força atômica estendendo sua faixa de varredura, o que permitiu ampliar o leque de experimentos e usuários (bioquímicos e biólogos), anteriormente restrito mais a área de física do estado sólido e química. Foi instalada também uma câmara para controle de umidade.

Com relação ao microscópio de tunelamento foi construído um sistema para o *baking*, uniformizando e melhorando o seu vácuo base para patamares da ordem de $2,8\text{E-}11\text{Torr}$ (contra $5,0\text{E-}10\text{Torr}$). Foi ainda construída e instalada uma fonte de evaporação de carbono para crescimento epitaxial *in situ*.

Está em construção uma pequena máquina de crescimento MBE (*molecular-beam epitaxy*) para semicondutores do grupo IV que servirá de protótipo para futuras instalações deste tipo. Atualmente, a MBE foi montada em *Rack* e foram instaladas 4 fontes de materiais e transferência de amostras. A MBE deverá iniciar sua operação em 2005 para uso interno.

Foi implementado o formulário eletrônico para submissão de propostas de pesquisa utilizando a infra-estrutura do MTA, sendo este aberto para submissão durante todo o ano, em regime de fluxo contínuo. Foi instalado também uma rede *Wi-Fi* para monitoração remota de experimentos por *LabView*.

O Laboratório de Microfabricação (LMF) do LNLS foi criado com o objetivo de fornecer equipamentos, conhecimento e infraestrutura para a pesquisa e desenvolvimento na área de microestruturas e microdispositivos. O LMF atua como um laboratório de apoio para os usuários internos e externos mas também como laboratório nacional aberto para a comunidade científica e industrial brasileira. Este ano foi instalada uma rede de gás nitrogênio e foi trocado o sistema de ar-condicionado, em particular na sala de fotografação, onde a temperatura pode agora ser controlada de forma independente, garantindo melhor controle nos processos.

O Laboratório de Filmes Finos foi concluído e já se encontra operacional para usuários internos. Sua abertura para os usuários externos está prevista para 2005, como parte das instalações do LMF. Este laboratório tem funcionando 2 sistemas de *sputtering* (1 sistema DC e outro RF), 2 evaporadoras térmicas com duplo filamento, plasma de oxigênio, um sistema de deposição de dielétricos e corrosão por íons reativos e uma evaporadora tipo *electron beam*. Além disso, pequenos equipamentos como elipsômetro, clivador de cristais e microscópios óticos estão também operacionais.

Foi instalado no Laboratório de Síntese Química de Nanopartículas (LSQ) um sistema ótico, com lâmpada de Xe para realizar sínteses fotoquímicas de nanopartículas anisotrópicas de Au e Ag, permitindo agora maior versatilidade na realização dos experimentos. Foi instalada uma segunda capela química, dedicada aos trabalhos do convênio LNLS-GETEC (ver Programa 5) e que envolvem ácidos/bases. Foi realizada uma grande reforma no laboratório, com a troca de todo o sistema de ar-condicionado para suprir as novas necessidades de reposição e resfriamento do ar. Foi também substituído o forro do teto, melhorando o isolamento térmico. Foi importada uma cuba de Langmuir-Blodgett, que permitirá a fabricação de monocamadas de nanopartículas coloidais e estudos sobre as interações entre nanopartículas e transições de fases nesses sistemas.

Dois outros desenvolvimentos associados ao LSQ mas relacionados à instrumentação para as linhas de luz foram desenvolvidos e que se encontram à disposição dos usuários: um porta-amostra para linha de espalhamento a Baixos Ângulos (SAS) para medidas das nanopartículas em solventes orgânicos, e um forno capilar para estudos estruturais na linha de Absorção de Raios-X Dispersiva (DXAS).

O Grupo de Teoria (GT) preparou um portal virtual de colaborações entre pesquisadores teóricos e experimentais que permitirá um número maior de colaborações através da internet. Este portal permite a rápida publicação de resultados experimentais obtidos no LNLS, com acesso restrito a colaboradores, e discussões sobre aspectos teóricos dos projetos realizados.

2.2 - Apoio aos Pesquisadores Externos

Em 2004 foram realizadas 150 propostas de pesquisa no LME, das quais 134 externas e 16 internas, conforme ilustrado no Gráfico 7, demonstrando um significativo aumento em relação à 2003 (96 propostas).

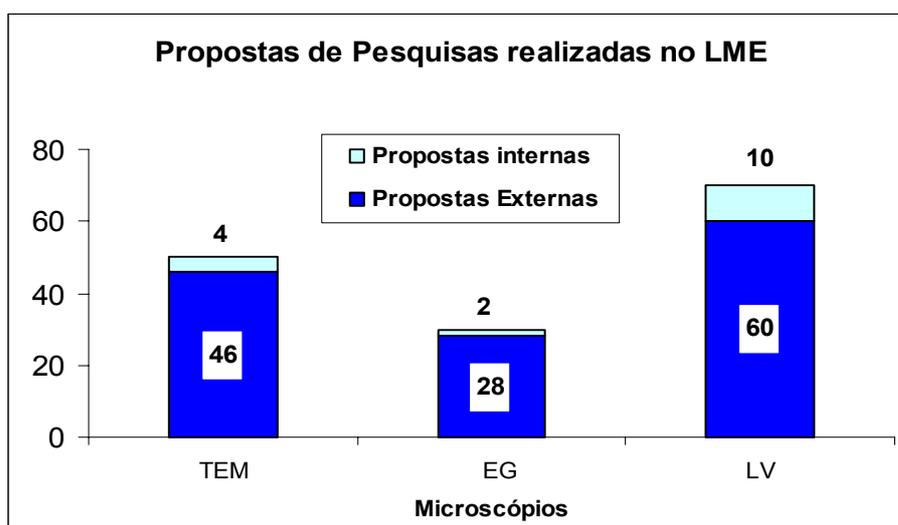


Gráfico 7: Distribuição das Propostas de Pesquisas no LME em 2004

Neste período, o Laboratório de Microscopia Eletrônica recebeu 145 usuários, dos quais 126 externos. Foram treinados 89 usuários, ampliando a comunidade capacitada para a utilização destes equipamentos.

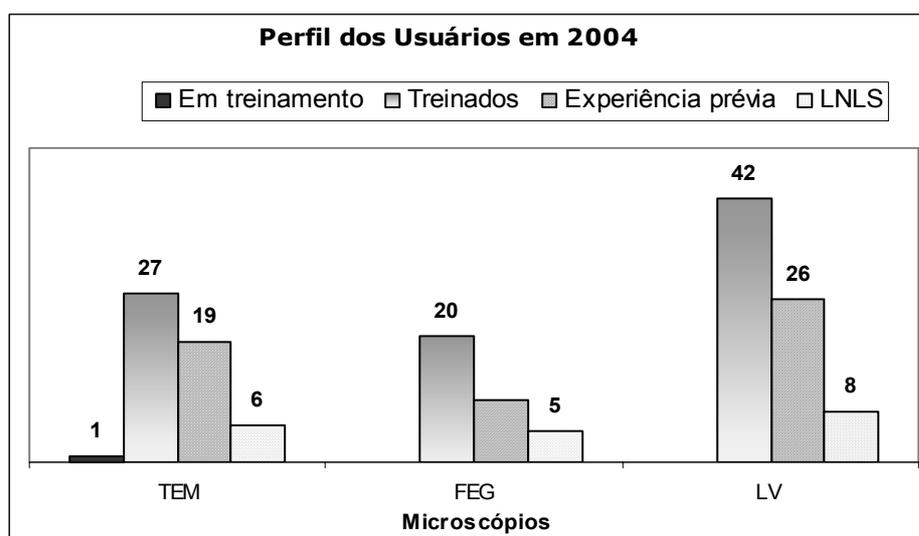


Gráfico 8: Perfil dos usuários do LME em 2004.

A introdução do sistema de submissão de projetos pela internet permitiu dobrar o número de usuários no AFM, o qual teve 20 projetos (16 externos) realizados em 2004. O microscópio, no entanto, começa a apresentar sinais de desgaste, que tendem a piorar com o tempo de uso. O microscópio foi fabricado, instalado e comissionado em 1999/2000 e, em breve, deve-se buscar uma solução para o aumento da demanda e a depreciação do equipamento. Está prevista, em projeto aprovado pelo CNPq, a aquisição de um novo AFM mas dedicado a litografia.

O Gráfico 9 demonstra a utilização do AFM durante o ano de 2004.



Gráfico 9: Perfil dos usuários do MTA em 2004

No LMF as propostas de pesquisa submetidas permanecem “abertas” por um período de 1 ano após a aceitação da mesma. Deste modo, o usuário pode realizar muitas visitas de trabalho, fato este que ocorre com a maioria das propostas até então aprovadas. Em 2004, das 24 propostas de pesquisa submetidas, 18 utilizaram regularmente a infraestrutura do LMF.

A distribuição dos usuários encontra-se no Gráfico 10, onde observamos significativa utilização por parte dos usuários externos e a participação da indústria no LMF (ver programa 5).

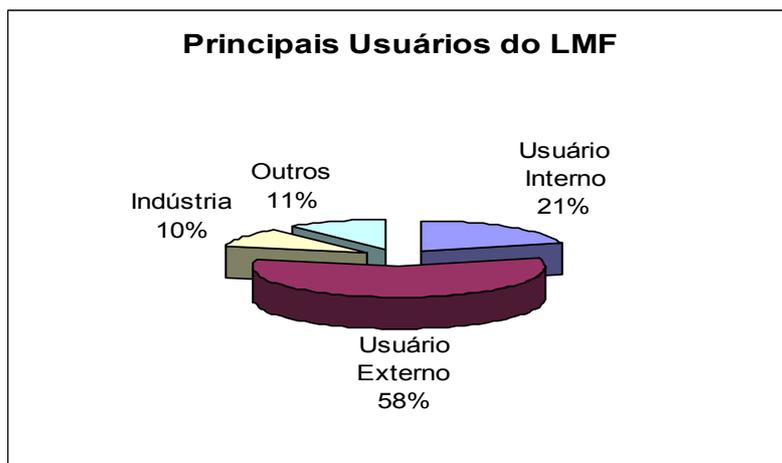


Gráfico 10: Distribuição por tempo de uso do LMF.

O Laboratório de Filmes Finos (LFF) foi utilizado por usuários internos, produzindo amostras para diversas finalidades de pesquisa e/ou aplicações. Vários projetos submetidos ao LMF utilizaram o LFF; estes dois laboratórios devem ser vistos como complementares.

Em 2004 o Grupo de Teoria manteve suas atividades de apoio teórico a projetos realizados no LNLS e buscou atrair novos pesquisadores nas áreas de física e química teórica para a formação de uma rede de colaborações entre pesquisadores teóricos e experimentais. Também com o objetivo de nuclear novas colaborações, no início do ano foi promovida uma oficina em física e química teórica que contou com a participação de alguns dos principais pesquisadores teóricos do país.

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

Este programa engloba as atividades desenvolvidas pelo Centro de Biologia Molecular Estrutural (CeBiME). O CeBiME é o centro coordenador da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo – SmolBNet - 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 instalação do Laboratório de Espectrometria de Massas foi concluída, tendo iniciado sua operação como instalação aberta a usuários em setembro de 2004. Além disso, o Laboratório de Espectrometria de Massas assumiu a coordenação do programa Proteoma envolvendo o convênio FINEP/MCT-FAPESP.

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

Em 2004 foram adquiridos equipamentos para complementar as instalações do CeBiME com recursos do projeto da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo – SmolBNet. Dentre estes equipamentos estão três novas estações gráficas para análise de estrutura de proteínas e uma estação que será destinada à nova linha de cristalografia que está sendo construída (linha MX2), além de acessórios para fazer ampliação da capacidade das estações adquiridas anteriormente. A sala de estações gráficas foi remodelada para melhor aproveitamento do espaço e acomodar as novas estações gráficas. Também foram adquiridos aparelhos para laboratório, incluindo um misturador de amostras (*quench flow*), dois incubadores com agitação e temperatura controlada, um *freezer* a -80°C, uma estufa de CO₂, um cromatógrafo, um microscópio para análise de cristais, além de uma série de pequenos equipamentos.

Por meio do programa CEPID-FAPESP (Centros de Pesquisa Inovação e Difusão) foi adquirido um novo espectropolarímetro cuja entrega está prevista para o início de 2005. Este novo aparelho será instalado no laboratório de espectrometria e calorimetria e duplicará nossa capacidade de análise de proteínas por dicroísmo circular. Através deste programa também foi obtida a pré-aprovação de recursos para importação de uma sonda criogênica (*cold probe*) para aquisição de dados com o aparelho de ressonância magnética nuclear de 600MHz. Esta sonda traz vantagens como melhor resolução e conseqüente necessidade de menor quantidade de amostra, redução do tempo de aquisição de dados, além de, em muitos casos, evitar a necessidade de se enriquecer a amostra com os isótopos ¹³C e ¹⁵N.

As atividades para tornar o Laboratório de Espectrometria de Massas um laboratório aberto e multi-usuário começaram no mês de março, após a contratação de um especialista para a área. Várias ações foram tomadas para adequar a infraestrutura do laboratório, tais como confecção de bancadas para preparação de amostras, criação de linha de gases (nitrogênio, argônio e ar comprimido), aquisição de geladeira, *freezer* e reagentes. Problemas de funcionamento foram diagnosticados e sanados nos dois aparelhos. Além do tempo dedicado à manutenção, foram realizadas diversas análises e durante o tempo livre dos equipamentos foi feito o treinamento de uma técnica de nível superior e de uma pós-doutoranda. Ainda como parte da implantação da infra-estrutura, foi providenciada atualização dos programas dos respectivos instrumentos e criada uma sala com quatro computadores (3 estações de trabalho e um servidor) para o processamento dos espectros pelos usuários. No final do ano foram recebidos equipamentos adicionais para este laboratório que incluem um cromatógrafo bidimensional, um “spotter” para preparação de placas de MALDI a partir de amostras fracionadas por cromatografia líquida e um sistema de “nano lockspray” para o espectrômetro de massa com ionização por eletro-spray.

A linha de Cristalografia Macromolecular (MX1) apresentava grande instabilidade do feixe, tendo sido realizados vários procedimentos de manutenção como intervenções no monocromador e a instalação de um filtro de carbono visando diminuir a carga térmica no monocromador. Detalhes desta manutenção estão apresentados no Programa 1.

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 e de laboratórios multi-usuários abertos. O Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, além de participar das redes, opera como laboratório multi-usuário, aberto a pesquisadores que realizam seus experimentos de forma independente desde 2003 e o Laboratório de Espectrometria de Massas passou a funcionar como laboratório multi-usuário aberto no primeiro semestre de 2004. Além disso, o CeBiME é responsável pela linha de luz MX1 que opera como instalação experimental aberta cujas atividades estão descritas no Programa 1.

3.2.1 – Rede Nacional de Biologia Estrutural

As atividades da Rede Nacional de Biologia Estrutural envolveram a realização de duas reuniões individuais com os 10 grupos participantes nas quais foram revisadas as propostas de pesquisa e estabelecidos objetivos específicos para cada grupo. As reuniões iniciais ocorreram em fevereiro de 2004, sendo seis delas no LNLS, e quatro no Centro Nacional de Ressonância magnética Nuclear da UFRJ, no Rio de Janeiro. A segunda rodada de reuniões ocorreu em agosto de 2004 no LNLS. Após as reuniões com os grupos, os recursos foram repassados para que estes pudessem desenvolver as atividades experimentais.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**Relatório Anual de 2004**

Treze pesquisadores ligados à Rede Nacional realizaram experimentos ou receberam treinamento no CeBiME, alguns dos quais fizeram mais de uma visita. Os pesquisadores foram treinados em clonagem e expressão de proteínas em cristalização e espectroscopia de proteínas (Tabela 6).

Dois grupos desenvolveram experimentos para caracterização cristalográfica de proteínas no LNLS. O grupo coordenado por Pedro L. de Oliveira cristalizou a proteína HELP, que liga grupos Heme, isolada diretamente da hemolinfa de carrapato. O grupo coordenado por Sônia Maria de Freitas cristalizou e obteve dados de difração de duas proteínas: a hemoglobina de raposa (*Serdocyon thous*) e o inibidor de protease SPCI da planta *Schizolobium parahyba*, cuja resolução da estrutura deve ocorrer em 2005.

Usuário	Coordenador do grupo	Instituição	Instalação do CeBiME	Visitas
Cristiane Lucas	Débora Foguel	UFRJ	Lab. Biologia Molecular	2
Davi R. da Silva	Sônia M. de Freitas	UNB	Lab. Cristalização	1
Deise S. Dantas	Lucimara F. A. Lima	UFRN	Lab. Biologia Molecular	1
Marcelo Santoro	Marcelo Santoro	UFMG	Lab. Biologia Molecular	1
			Lab. Espectroscopia	
Fabiana Albernaz	Fábio Almeida	UFRJ	Lab. Biologia Molecular	2
Liliana Rosa Alves	Pedro Oliveira	UFRJ	Lab. Cristalização	
Luiz G. Milletti	Hernán Terenzi	UFC	Lab. Biologia Molecular	1
Marcos Sorgine	Pedro Oliveira	UFRJ	Lab. Biologia Molecular	1
Marcus M. Araújo	Sônia M. de Freitas	UNB	Lab. Biologia Molecular	1
Maria Clara L. N. Silva	Pedro Oliveira	UFRJ	Lab. Cristalização	
Sônia M. de Freitas	Sônia M. de Freitas	UNB	Lab. Cristalização	1
			Lab. Espectroscopia	1
Uaska B. e Silva	Lucimara F. A. Lima	UFRN	Lab. Biologia Molecular	1
Willy Jablonka	Mônica Montero	UFRJ	Lab. Biologia Molecular	2

Tabela 6: Resumo do uso das instalações do CeBiME por pesquisadores ligados à Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural

3.2.2 – Rede de Biologia Estrutural do Estado de São Paulo

Durante o primeiro semestre de 2004, 31 pesquisadores de diversos níveis ligados à Rede de Biologia Estrutural do Estado de São Paulo utilizaram as instalações do CeBiME, atingindo um total de 112 visitas. A lista de usuários com as respectivas instalações utilizadas está apresentada na Tabela 2. O projeto já se encontra no seu terceiro ano de funcionamento. As visitas correspondem em geral a períodos de 1-3 dias, sendo que a maioria dos pesquisadores vem para o CeBiME realizar experimentos de cristalização ou de coleta de dados de difração de raios-X. Alguns projetos já estão na fase de análise da estrutura das proteínas, exigindo que o tempo de permanência dos estudantes e pós-doutorandos que estão sendo treinados com estas técnicas seja mais longo, já que são necessários alguns semestres para um estudante poder realizar a análise estrutural de uma proteína.

Em novembro de 2004 a FAPESP, através de um comitê internacional, realizou a avaliação da Rede de Biologia Estrutural do Estado de São Paulo. O programa teve uma avaliação positiva e foi prorrogado até Outubro de 2006.

As proteínas dos projetos da rede cuja caracterização cristalográfica realizada no LNLS está avançada são:

Grupo coordenado por Luis Soares Neto:

- Ohr (hydroperoxide resistace protein) de *Saccharomyces cerevisiae*: análise da estrutura concluída e artigo em preparação.
- GRX2 (glutaredoxinII) de *Saccharomyces cerevisiae*: resolução e refinamento da estrutura concluídos.
- TRR (Tio redoxina redutase) de *Saccharomyces cerevisiae*; resolução e refinamento da estrutura concluídos.

Grupo coordenado por Sérgio Shenkman:

- Infestina 4 de *Triatoma infestans*: estrutura resolvida e refinada; artigo da resolução da estrutura sendo preparado.

Grupo coordenado por Chuck Farah:

- Xac2396: proteína sem função conhecida de *Xanthomonas axonopodis*, estrutura em fase de refinamento.

Grupo coordenado por Walter Terra:

- lisozima de inseto: estrutura em fase de refinamento.

Duas proteínas de *Xanthomonas axonopodis* estão sendo caracterizadas pela técnica de ressonância magnética nuclear:

Grupo coordenado por Chuck Farah

- ClpS: assinalamento da cadeia principal concluído; assinalamento das cadeias laterais em fase de conclusão.
- OmlA: assinalamento da cadeia principal concluído; assinalamento das cadeias laterais em fase de conclusão.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Usuário	Coord. do grupo	Instituição	Instalação do CeBiME	Visitas
Andréa B. Fernandes	Luiz Carlos de S. Ferreira	USP	Laboratório de Cristalização	7
			Lab. de Espectroscopia	7
Ari J. Scattone Ferreira	Hamza F. El-Dorry	USP	Lab. RMN	3
Carlos M. Kikuti	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Laboratório de Cristalização	3
Celso Romero Ramos	Hamza F. El-Dorry	USP	Laboratório de Cristalização	6
Cristiane S. de Souza	Shaker C. Farah	USP	Laboratório de Cristalização	2
Ecauê Pereira da Costa	Ronaldo C. Araújo	UMC	Laboratório de Cristalização	
Eduardo Hilario	Sandro R. Valentini	UNESP	Laboratório de Cristalização	8
Eduardo Kiota	Marcelo Menossi	UNICAMP	Lab. Purificação de Proteínas	6
			Laboratório de Cristalização	2
Felipe Chambergo	Hamza F. El-Dorry	USP	Laboratório de Cristalização	4
José Sérgio M. Soares	Tomomasa Yano	UNICAMP	Lab. RMN	1
Iscia Cendes	Iscia Cendes	UNICAMP	Lab. de Biologia Molecular	1
Ivan T. N. Campos	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Laboratório de Cristalização	7
Juliana Silva Luz	Hamza F. El-Dorry	USP	Laboratório de Cristalização	3
Leonor Galvão-Botton	Chuck Farah	USP	Lab. RMN	1
Lilia F. Rodriguez de Souza	Iscia Cendes	UNICAMP	Lab. de Biologia Molecular	1
Luciana Kauer Rosselli	Tomomasa Yano	UNICAMP	Lab. RMN	2
Luciano H. Apponi	Sandro R. Valentini	UNESP	Laboratório de Cristalização	5
Maria C. S. Moraes	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Laboratório de Cristalização	6
Maria C. Sarti Jimenez	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Lab. de Espectroscopia	1
Maria C. C. Garcia	Iscia T. Lopes Cendes	UNICAMP	Lab. de Biologia Molecular	1
			Lab. Purificação de Proteínas	1
Rafael M. Martins	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Lab. RMN	1
Regina Afonso	Ismael D. C. Guerreiro da Silva	UNIFESP	Laboratório de Cristalização	2
			Lab. de Biologia Molecular	5
			Lab. de Espectroscopia	2
Ricardo J. S. Torquato	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Laboratório de Cristalização	1
Ronaldo C. Araújo	Ronaldo C. Araújo	UMC	Laboratório de Cristalização	4
Sérgio Shenckman	Sérgio Shenckman	UNIFESP	Lab. de Espectroscopia	1
Sandro R. Marana	Walter R. Terra	USP	Laboratório de Cristalização	9
Susely F. S. Tada	Tomomasa Yano	UNICAMP	Laboratório de Cristalização	4
Victor Genu Faria	Luis Soares Netto	USP	Laboratório de Cristalização	4
Viviane Souza Alves	Sérgio Schenkman	UNIFESP	Laboratório de Cristalização	1
Total usuários: 29			Total visitas	112

Tabela 7: Resumo do uso das instalações do CeBiME por membros da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Usuários em tempo integral no CeBiME			
Marcos A. de Oliveira	Luis Soares Netto	USP	Análise de estrutura cristalográfica
Karen Furlan Discola	Luis Soares Netto	USP	Análise de estrutura cristalográfica

Tabela 7 (continuação): Resumo do uso das instalações do CeBiME por membros da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo

3.2.3 – Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear aberto a pesquisadores externos com tempo concedido por mérito dos projetos

A partir de maio de 2003, além dos trabalhos nas Redes, uma parcela do tempo do Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear - RMN passou a funcionar como laboratório multi-usuário aberto. Em 2003 foram realizadas duas chamadas para submissão de projetos, sendo avaliadas no total 15 propostas. A maioria das propostas não era adequada para a execução, tendo sido realizado quatro propostas de pesquisas por usuários externos em 2004. Foi aberta uma segunda chamada para submissão de projetos no final de 2004.

A operação do Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear foi bastante deficiente (Gráfico 11 e Gráfico 12), sendo a razão principal a operação de troca do magneto do aparelho de 600 MHz. Este aparelho não operou até o final do mês de abril devido à demora na substituição e instalação do novo magneto. O processo de substituição do magneto foi iniciado em outubro de 2003 e foi feito pelo fornecedor, dentro do período de garantia do aparelho, sem custo financeiro para o LNLS. Sua conclusão ocorreu apenas no 1º semestre de 2004. Nos meses seguintes, o funcionamento foi prejudicado pela queima do *no-break*, havendo perda dos dados com as quedas de energia. O problema foi sanado com a instalação de novos *no-breaks*.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2004

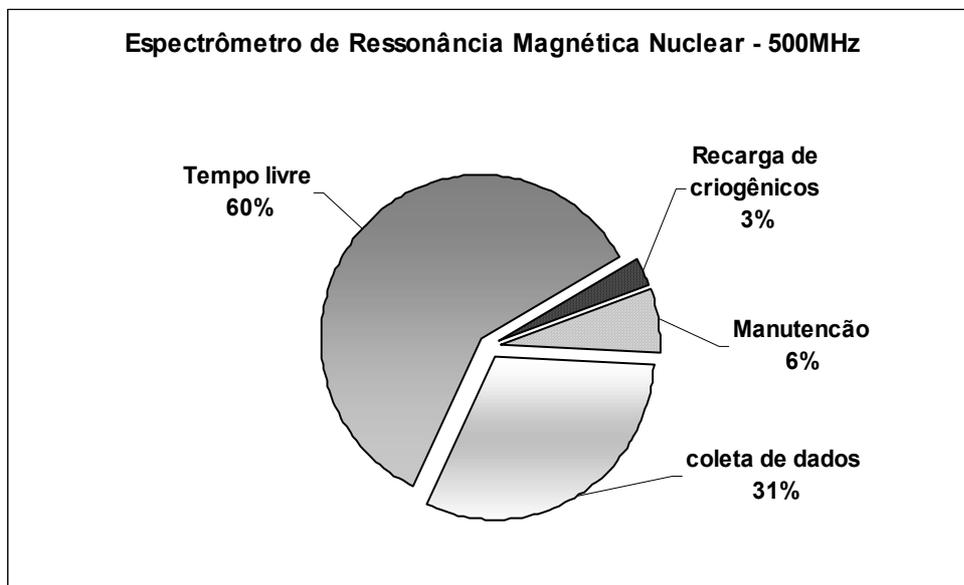


Gráfico 11: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear de 500 MHz

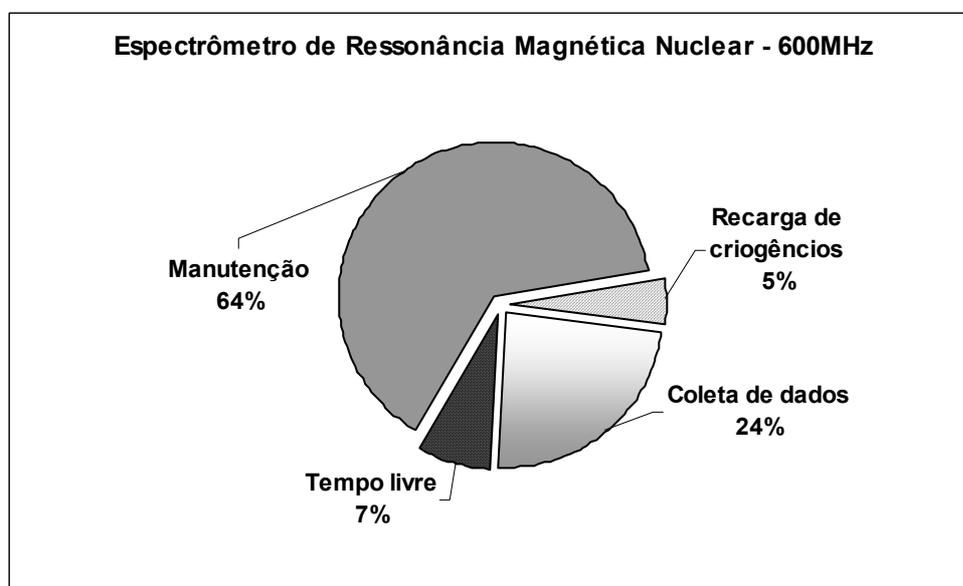


Gráfico 12: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear de 600 MHz

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

3.2.4 – Laboratório de Espectrometria de Massas aberto a pesquisadores externos com tempo concedido por mérito dos projetos

No período de 18 de junho a 21 de julho, foi aberta a primeira chamada para submissão de projetos por parte de pesquisadores externos, iniciando oficialmente a abertura do laboratório. Foram recebidas 51 propostas de pesquisa. Essas propostas foram encaminhadas para os assessores externos para emissão de parecer sobre o mérito científico durante o mês de julho. A reunião do comitê, para distribuição do tempo aos projetos aprovados, foi realizada em agosto e os trabalhos iniciados em setembro. O treinamento aos usuários com o uso dos aparelhos está sendo feito concomitantemente com a realização dos projetos. Para o período de setembro/2004 a fevereiro/2005 foram agendados 20 projetos que foram considerados prioritários pelo comitê. São 4 propostas de instituições do Rio de Janeiro; 2 do Rio Grande do Sul, 1 do Distrito Federal, 1 do Ceará e 12 de instituições de São Paulo.

As propostas agendadas para espectrometria de massas estão relacionadas a seguir:

Título	Pesquisador Responsável	Instituição	Estado
Sequenciamento de duas novas lectinas e uma tionina isoladas de sementes de Leguminosas.	Benildo Sousa Cavada	Universidade Federal do Ceará	CE
Expression of the human mRNA binding protein NSAP1 for structural and functional studies e Estudos funcionais e estruturais das proteínas reguladoras Ki-1/57 e CGI-55 e das proteínas que interagem com elas	Jörg Kobarg	Laboratório Nacional de Luz Síncrotron	SP
Estudo da interação entre IRE (Iron Responsive Element) e IRP1 (Iron Regulatory Protein 1) por espectrometria de massas	Nilson Zanchin	Laboratório Nacional de Luz Síncrotron	SP
Projeto Genoma Funcional de Micoplasmas	Henrique Bunselmeyer Ferreira	Universidade Federal do Rio Grande do Sul	RS
Caracterização estrutural e funcional da proteína Ohr	Luis Eduardo Soares Netto	Universidade de São Paulo - São Paulo	SP
Identificação de Proteínas de Membrana de <i>Leptospira interrogans</i> sorovar Copenhageni Através da Análise Proteômica	Ana Lucia Tabet Oller Nascimento	Instituto Butantan	SP
Simulação experimental de processos de fotólise em atmosferas pré-bióticas utilizando luz síncrotron na faixa de 5 a 20 eV	Arnaldo Naves de Brito	Laboratório Nacional de Luz Síncrotron	SP
Estudo da secreção da pele dos anfíbios <i>Phyllomedusa bicolor</i> e <i>Physalaemus nattereri</i> : identificação e caracterização de neuropeptídeos e peptídeos antimicrobianos	Tatiane Iembo	Universidade de Brasília	DF
Investigação de marcadores protéicos do carcinoma oral	Eloiza Helena Tajara	Universidade Estadual Paulista - São José do Rio Preto - São José do Rio Preto	SP

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**Relatório Anual de 2004**

Título	Pesquisador Responsável	Instituição	Estado
Estrutura e função de histonas de Trypanosoma	Sergio Schenkman	Universidade Federal de São Paulo	SP
Caracterização de uma proteína de Neurospora crassa que liga à região promotora do gene gsn e regula a transcrição durante estresse térmico	Maria Célia Bertolini	Universidade Estadual Paulista - Araraquara	SP
Nanopartículas de metais de transição em líquidos iônicos derivados do cation 1,3-dialquilimidazólio: catalisadores para reações de hidrogenação em meio bifásico	Jairton Dupont	Universidade Federal do Rio Grande do Sul	RS
Análise da interação das prolaminas de milho e milheto com ácidos graxos por RMN	Lucimara Aparecida Forato	Empresa Brasileira de Pesquisas Agropecuárias	SP
Estudo de diferentes famílias de proteínas presentes nos venenos de serpentes: lectina-símile, trombina-símile, desintegrinas e peptídeos	Russolina Benedeta Zingali	Universidade Federal do Rio de Janeiro	RJ
Análise de proteoma da bactéria diazotrófica Gluconacetobacter diazotrophicus e de sua interação endofítica com plantas - Rede Proteômica do Rio de Janeiro	Paulo Mascarello Bisch	Universidade Federal do Rio de Janeiro	RJ
Proteômica De Expressão Em Vibrio Cholerae	Ana Maria Abrantes Coelho	Universidade Federal do Rio de Janeiro	RJ
Caracterização Espectroscópica E Morfológica Dos Nanocompósitos De Polímeros Condutores Em Diferentes Matrizes	Márcia Laudelina Arruda Temperini	Universidade de São Paulo - São Paulo	SP
Contribuições Analíticas no Desenvolvimento de Análises	Emanuel Carrilho	Universidade de São Paulo - São Carlos	SP
Biologia Estrutural De Vetores De Doenças	Francisco Javier Medrano Martin	Laboratório Nacional de Luz Síncrotron	SP
Caracterização De Proteases E Derivados Peptídicos Como Alvos Terapeúticos E Diagnósticos	Salvatore Giovanni De Simone	Fundação Instituto Osvaldo Cruz	RJ

Tabela 8: Propostas agendadas para Espectrometrias de Massa

4. P, D & I em Aceleradores

4.1 - Melhoramentos no Anel de Armazenamento

4.1.1 Comissionamento do novo sistema de RF do anel de armazenamento.

Após a duplicação e comissionamento parcial do sistema de RF ocorrida no segundo semestre de 2003, a operação para usuários no início de 2004 foi realizada apenas com a cavidade previamente instalada, mantendo-se a nova cavidade estacionada, fora de ressonância e sem potência. Esta forma de operação, utilizada temporariamente enquanto o condicionamento da segunda estação de RF era finalizado, trouxe dificuldades operacionais. De fato, ao longo destes primeiros meses do ano, experimentamos uma série de dificuldades relativas à estabilidade do feixe de elétrons justamente em função da dificuldade de se encontrar a condição adequada de estacionamento da cavidade passiva. Essas instabilidades geravam perturbações no fluxo de fótons medido em algumas das linhas de luz e foram diagnosticadas como decorrentes da interação do feixe de elétrons com modos longitudinais da cavidade.

Após tentativas infrutíferas de resolver o problema das instabilidades, modificando os parâmetros da cavidade passiva decidiu-se por uma parada emergencial da máquina por 4 semanas com a finalidade de colocar a segunda estação de RF em operação. Ao longo do mês de junho a nova estação foi comissionada e a operação com duas cavidades passou a ser rotineira. Após um estudo minucioso de medidas realizadas nas duas cavidades de RF concluiu-se que as instabilidades são causadas por um dos modos longitudinais da nova cavidade. A cavidade foi colocada em uma configuração em que a excitação do modo indesejável é mínima. O problema das instabilidades somente foi resolvido através de uma solução ativa com objetivo de modificar o perfil longitudinal dos pacotes de elétrons e, desse modo, modificar o modo como eles interagem com as cavidades. Para isto, foi introduzida uma modulação de fase no sinal piloto da RF. Essa solução é adotada em outros laboratórios como uma maneira rotineira de suprimir as instabilidades longitudinais do feixe de elétrons, mas só se tornou viável operacionalmente após ter sido encontrada a configuração adequada para as cavidades de RF.

Na condição atual de operação, o sistema de RF opera com folga de potência, com duas cavidades, estando apto a atender as demandas extras de potência que decorrerão da instalação de dispositivos de inserção no futuro próximo.

4.1.2 Melhoramentos na Blindagem da Fonte de Luz Síncrotron

Seguindo as recomendações do Comitê Técnico-Científico, deu-se prosseguimento ao projeto de cobertura da fonte de luz síncrotron visando permitir a permanência dos usuários no Hall experimental mesmo durante o processo de injeção. No primeiro semestre de 2004 foi definido o projeto final. Optou-se pela cobertura com blocos de concreto, apoiados na blindagem de concreto do lado externo do anel e em uma estrutura metálica na parte interna, sendo que esta

estrutura metálica também atua como base de sustentação para os blocos de concreto verticais.

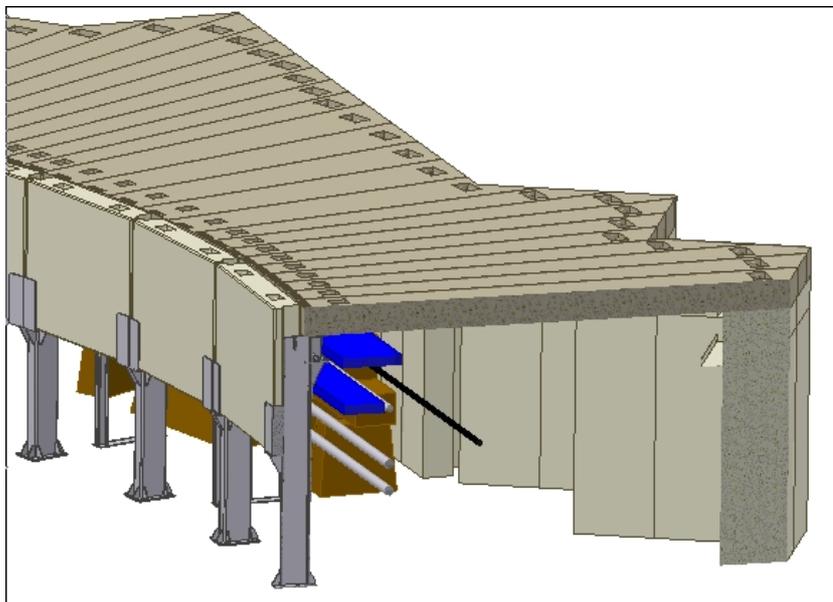


Figura 2: Conceito modular para a estrutura da nova blindagem de concreto da fonte de luz síncrotron

Foram executados cálculos para verificação da resistência e estabilidade da estrutura metálica submetida às solicitações provenientes das cargas dos blocos de concreto. Foram realizados estudos para determinar os efeitos da nova cobertura sobre o piso de concreto do Hall experimental. Testes experimentais validaram as análises teóricas.

Como parte dos procedimentos de preparação para a instalação da cobertura, foram rearranjadas as posições dos *racks* de equipamentos localizados no interior do anel de armazenamento e modificadas as calhas dos *front-ends* das linhas de luz. Essas atividades foram realizadas durante paradas programadas ao longo do ano. Com isso, liberou-se o espaço necessário à montagem da estrutura metálica para sustentação dos blocos de concreto, que foi instalada durante o mês de outubro. Os blocos da cobertura foram instalados à medida que foram sendo entregues pelos fornecedores. A instalação deve estender-se até fevereiro de 2005.



Figura 3: A nova blindagem de concreto da fonte de luz síncrotron em Janeiro de 2005.

4.1.3 Estudos de Dipolos de Alto Campo

Em 2003 foi concluído o projeto de uma fonte de 500 A que poderá alimentar os eletroímãs dipolares (dipolos) atuais do anel de armazenamento, que permitirá a elevação da energia do feixe de elétrons para 1,6 GeV. Uma fonte capaz de alimentar um único dipolo foi construída e operou com sucesso com um dos protótipos dos atuais dipolos do anel. Com 500 A de corrente, a despeito do núcleo altamente saturado, o campo no entreferro do dipolo chega a 2 T, o que equivaleria a uma energia de 1,64 GeV. A análise dos resultados das medidas de campo magnético efetuadas sobre o dipolo permitirão determinar a viabilidade ou não de se elevar a energia da fonte de luz. Essas medidas encontram-se em andamento.

4.1.4 Sistema de Controle dos Aceleradores

Foi iniciado em 2004 um remodelamento da rede de comunicação da sala de controle visando permitir o armazenamento e manipulação dos dados provenientes da monitoração dos parâmetros operacionais dos aceleradores. Isso possibilitará um diagnóstico mais rápido e mais eficiente dos problemas assim como permitirá levantamentos mais detalhados de *performance* da fonte de luz. Foi realizado um *upgrade* na rede de comunicação, na capacidade de armazenamento de dados e na velocidade de acesso a disco dos computadores principais de controle dos aceleradores.

Além disso, foi implementada uma nova versão do programa de controle dos aceleradores, que possibilita ao programa atuar não só utilizando o protocolo proprietário LOCO desenvolvido no LNLS mas também via comunicação ethernet. Este será o protocolo de comunicação utilizado no controle do primeiro dispositivo de inserção a ser instalado na fonte de luz síncrotron do LNLS.

4.1.4 Diagnóstico de Feixe: Estabilidade de Órbita

O esforço permanente de melhorar a estabilidade da órbita do feixe de elétrons teve continuidade em 2004 com a instalação de novos dispositivos de monitoração do feixe e com melhorias efetuadas naqueles já instalados. Foi criada uma força tarefa, integrando o trabalho de vários grupos técnicos das áreas de aceleradores e das linhas de luz, para estudar e propor meios de melhorar a estabilidade de órbita. Do trabalho dessa força tarefa descrevemos a seguir as atividades realizadas em 2004 que visaram conseguir melhorias na monitoração e estabilização da órbita do feixe de elétrons.

Ao longo do ano foram realizados testes com os monitores de posição do anel de armazenamento na tentativa de identificar e reduzir as causas de ruídos nas leituras da órbita do feixe de elétrons. Como resultado desses testes uma série de modificações foram implementadas no sistema de medidas de órbitas. As eletrônicas dos monitores de posição foram acondicionadas em caixas de alumínio com boa blindagem para ruídos eletromagnéticos e os cabos de RF dos monitores foram substituídos por cabos com melhor blindagem. Cada caixa hospeda duas eletrônicas e uma fonte de alimentação, e conta com divisores e atenuadores variáveis na entrada do sinal de RF proveniente dos monitores de posição. Isto possibilita uma melhor adequação dos níveis de sinais para as eletrônicas e que estes possam ser monitorados em paralelo por outros equipamentos, o que permite um melhor diagnóstico dos problemas que afetam as medidas de posição. Os resultados indicam uma sensível melhora na qualidade dos sinais gerados pelo sistema de medida de posição.

Em 2004 foi instalada uma nova linha de luz para diagnóstico do feixe de elétrons (DFX), que faz uso da radiação síncrotron emitida no espectro de raios-X, e que será utilizada para estudos do feixe de elétrons e para o desenvolvimento de instrumentação científica. Dois monitores de posição de raios-X foram instalados na linha DFX, um deles desenvolvido no próprio LNLS. Foi utilizada a eletrônica de tratamento de sinais adquirida comercialmente para testar os dois monitores, que apresentaram resultados idênticos. O monitor do LNLS foi concebido para usar tecnologias já disponíveis no LNLS, proporcionando assim uma significativa redução de custo. Além disso, sua geometria é mais adequada para adaptação nas linhas de luz já existentes. Uma eletrônica de tratamento de sinais foi projetada e dois protótipos foram construídos. Na linha DFX também foi instalado um monitor de raios-X de fio desenvolvido no LNLS e que deve ser testado em 2005. Finalmente, a linha DFX conta com um monitor de perfil e posição baseado numa câmara CCD que faz a imagem do feixe de elétrons utilizando os raios-X que passam por um arranjo de orifícios (*pin-holes*). Esta câmara complementa (com vantagens em termos de resolução) o diagnóstico já provido por uma outra câmara CCD instalada no Dipolo 3, em uma linha de luz visível.

Por fim, foram instalados no anel de armazenamento 6 monitores de perda de feixe de elétrons. Esses monitores têm sido uma ferramenta útil para o diagnóstico e estudo das características do feixe armazenado.

4.1.5 Controle de Temperatura do Hall Experimental

De modo a reduzir a amplitude das variações de temperatura dentro do hall experimental, garantindo maior estabilidade térmica a uma série de componentes tanto dos aceleradores quanto das linhas de luz, foram instalados conjuntos de resistências no sistema de ventilação do prédio do anel. Espera-se que parte das derivas térmicas observadas durante o ciclo de operação da máquina seja eliminada pelo novo sistema de controle de temperatura.

4.1.6 Instalação dos novos Kickers com Câmaras de Vácuo Cerâmicas

Os *kickers* são ímãs pulsados com núcleo de ferrite utilizados no processo de injeção no anel de armazenamento. Nos antigos *kickers* todo o ímã estava acondicionado dentro da câmara de vácuo do anel, com o núcleo de ferrite diretamente exposto aos campos gerados pelo feixe de elétrons. Altas correntes no anel (particularmente quando concentrada em um pequeno número de pacotes de elétrons) causavam o aquecimento das ferrites e uma queda na eficiência de injeção. Em algumas situações, esta queda de eficiência podia até mesmo impossibilitar a utilização da máquina, sendo necessário aguardar o resfriamento dos *kickers* para se prosseguir a operação normal. Soluções paliativas (resfriamento externo com água gelada) e procedimentos de injeção que evitam a concentração de corrente excessiva em poucos pacotes foram implementados ainda em 2001 para contornar a situação, mas a solução padrão para o problema é retirar as ferrites da câmara de vácuo. A dificuldade é construir uma câmara de vácuo que blinde os campos do feixe de elétrons mas não blinde os campos pulsados do kicker. Foi desenvolvida no LNLS uma câmara cerâmica revestida internamente por um filme de titânio com essas características. Os três kickers do anel foram substituídos com êxito por novos kickers com câmaras cerâmicas e desde então não mais observamos sobreaquecimento dos mesmos.

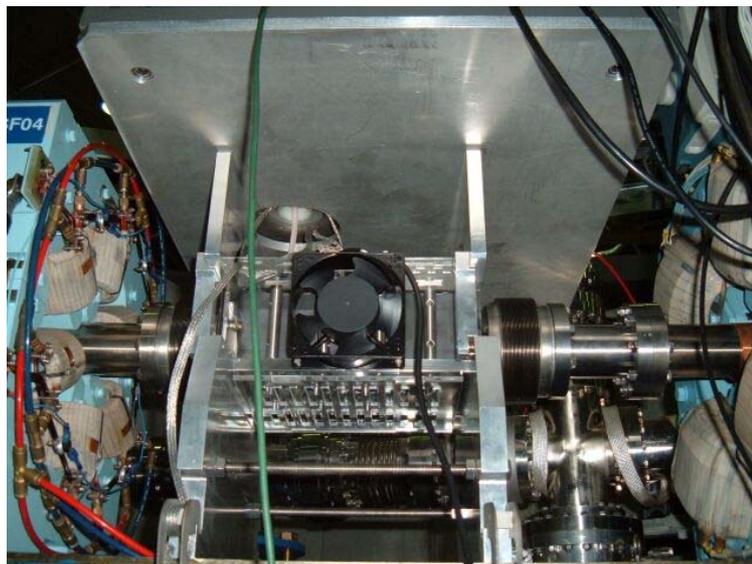


Figura 4: Um dos novos kickers de injeção do anel UVX

4.2 - Dispositivos de Inserção

Em janeiro de 2004 chegou ao LNLS o *wiggler* multipolar híbrido de 2,0 T construído por um fornecedor externo (*STI Optronics, Bellevue, EUA*) e que fornecerá a luz síncrotron para uma nova linha de luz de cristalografia de proteínas. O dispositivo foi levado ao Laboratório de Ímãs para ser caracterizado magneticamente e para que fosse testada a sua estabilidade mecânica na movimentação para a mudança de *gap* (abertura entre os pólos). As medidas magnéticas estão sendo realizadas com as técnicas de bobina girante e com sensores Hall. A análise com bobina girante mostrou que a composição multipolar magnética integrada está dentro das especificações requisitadas ao fabricante. Medidas de campo locais com sensores Hall indicam que o campo magnético atinge a intensidade e o perfil requisitados. O *wiggler* será instalado no anel de armazenamento em fevereiro de 2005.



Figura 5: Dispositivo wiggler multipolar híbrido de 2 T na bancada de caracterização no Laboratório de Ímãs

Em 2003 foram construídos os primeiros protótipos da câmara de vácuo do *wiggler*, desenvolvidas no LNLS por razões de custo. Diferentes processos de fabricação foram estudados, visando garantir que as tolerâncias mecânicas e térmicas sejam satisfeitas. A câmara do *wiggler* é longa e possui baixa condutância de vácuo, o que representa um problema para se atingir a pressão no padrão necessário. O bombeamento de vácuo é conseguido com a deposição, ao longo da

superfície interna da câmara, de uma película absorvedora de gases (NEG – *getter* não evaporável). Em outubro de 2004 a câmara de vácuo do *wiggler* foi instalada no trecho 1 do anel. A deposição do NEG foi realizada no laboratório ESRF em Grenoble. A instalação e ativação da câmara foram bem sucedidas, com uma rápida recuperação das condições de vácuo no trecho.

Além do dispositivo *wiggler* adquirido com recursos FAPESP, o LNLS está também desenvolvendo e construindo em suas próprias oficinas um dispositivo ondulador elíptico que será capaz de produzir luz síncrotron de alto brilho na faixa do ultra-violeta, com completo controle de polarização. A mecânica do ondulador está definida e todas as partes de controle e movimentação compradas. Um aparato com 1/8 do comprimento total do ondulador está em construção para testes de precisão e praticidade de montagem mecânica, acionamento e controle de movimentações e esforços mecânicos. Todas as partes do protótipo estão compradas e armazenadas no LNLS. Os blocos magnéticos apresentaram falhas de caracterização do fornecedor e, foram reenviados ao fornecedor. Eles retornaram ao LNLS no final de dezembro de 2004. As montagens seqüenciais dos blocos nos suportes mecânicos foram iniciadas, baseadas em um algoritmo de embaralhamento que visa garantir um campo magnético dentro das especificações de dinâmica de feixe e qualidade de luz emitida.

A bancada de testes e caracterização magnética para dispositivos de inserção foi concluída e testada. Tanto medidas com pontas Hall como medidas com bobinas girantes estão disponíveis. A repetibilidade da bancada foi testada no processo de aferição das medidas magnéticas efetuadas pela STI Optronics. Esta bancada será usada para caracterizar e fazer ajustes finos no ondulador.

5. Interação com o Setor Industrial

No ano de 2004 foi iniciado o processo de reestruturação do programa de interação com o setor industrial. Foram discutidas novas diretrizes e mecanismos para reforçar a participação do LNLS na inovação científica e tecnológica do país com sua inserção no setor produtivo. Esta discussão está em curso e deve convergir em breve.

Apresentamos a seguir as atividades e projetos de interação com o setor industrial ocorridos no ano de 2004.

5.1 - Projetos de Desenvolvimento:

Desenvolvimento de Catalisadores - GETEC

O programa de interação GETEC-ABTLuS iniciou-se em 2002 e tem como objetivos principais a caracterização dos catalisadores produzidos na GETEC Guanabara Química Industrial S/A, bem como o desenvolvimento de novos catalisadores, mais eficientes e seletivos. A partir de 2003 foram incorporados recursos do Fundo Verde-Amarelo e recursos do CNPq a partir do final de 2004, por meio do Edital P&D de Produtos e Processos Inovadores em Nanotecnologia.

A primeira fase do projeto, realizada até o final de 2003, foi exploratória e o principal enfoque foi a caracterização estrutural e morfológica dos catalisadores atualmente utilizados pela GETEC, utilizando técnicas de Luz Síncrotron e Microscopias Eletrônicas.

No início de janeiro de 2004, iniciaram-se também trabalhos relacionados ao desenvolvimento de catalisadores de maior atividade, seletividade e vida útil, envolvendo 3 linhas principais de atividades: (I) a instalação da infra-estrutura necessária para a produção dos catalisadores; (II) a obtenção da liga precursora de Ni-Al e (III) o estudo da influência da granulometria da liga nas características do catalisador final obtido. Com relação à instalação da infra-estrutura, foram dimensionados os reatores de digestão da liga para a produção do catalisador e de hidrogenação de polióis. No segundo semestre de 2004, foi iniciada a instalação da infraestrutura necessária para a fabricação dos catalisadores e realização dos testes de atividade catalítica, em escala piloto, no LNLS. Isso irá permitir uma maior dinâmica na correlação da atividade catalítica na hidrogenação de polióis. Na obtenção e caracterização da liga precursora de Ni-Al, amostras foram obtidas em diferentes condições de resfriamento em forno de indução.

Na segunda fase, que se inicia em 2005, as atividades de instalação de infraestrutura para produção de catalisadores e análise detalhada da liga precursora de Ni-Al serão finalizadas. Estudo da influência da granulometria da liga nas características do catalisador final obtido serão realizados. Nessa fase, o enfoque será dado na otimização do processo existente de fabricação dos catalisadores e prospecção de novas metodologias baseadas em técnicas e conceitos de nanociência e nanotecnologia. Espera-se que esses resultados levem a propostas de melhorias no processo de fabricação atual utilizado na GETEC na produção de catalisadores para hidrogenação.

Uma terceira fase iniciará em 2005, em paralelo com os desenvolvimentos da segunda fase, o enfoque será dado na otimização do processo existente de fabricação dos catalisadores e prospecção de novas metodologias baseada em técnicas e conceitos de nanociência e nanotecnologia.

Computação Quântica – Hewlett-Packard do Brasil

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. O projeto foi iniciado em 2002 e conta com recursos da HP dentro da Lei de Informática .

O ano de 2004 representou o terceiro ano de trabalhos colaborativos entre a HP Brasil e o LNLS. Dentro da lei de informática, uma variedade de atividades relacionadas a tecnologia de informação são realizadas, mas focalizada principalmente em aspectos de ciência básica, *hardware* e ciência de materiais. Em 2004 as principais atividades consistiram na construção e operação de laser de T:Safira, operando em modo CW de maneira reprodutível na faixa de 770 nm até 960 nm, e em caráter experimental em *mode-lock*. Houve também melhorias no sistema de evaporação, que incluiu a construção de vários evaporadores por feixe de elétrons para a deposição de materiais refratários. No âmbito deste projeto, o estudante de Iniciação Científica Antonio Carlos Torrezan recebeu o prêmio de melhor trabalho de graduação da América Latina conferido pelo IEEE na seção de microondas. O projeto é avaliado pela HP Brasil de maneira regular, além de revisão feita pelos HP Labs realizada em Palo Alto, Califórnia, e uma realizada em Porto Alegre, com a visita dos diretores dos HP Labs Palo Alto e Bristol.

Caracterização Avançada de Fumos de Soldagem – D&L

A companhia D&L Welding Fumes Analysis, LLC, é um *spin-off* da *Ohio State University*, localizada em Columbus-OH-EUA, especialmente criada para desenvolver estudos avançados sobre o processo de geração de fumos. Esta companhia de elevado teor tecnológico presta consultoria para os maiores produtores mundiais de equipamentos e materiais relacionados com a indústria da soldagem, os quais estão interessados em conhecer melhor os fenômenos associados à formação destes fumos, visando minimizar os efeitos na saúde dos soldadores.

O projeto conjunto D&L-LNLS visa o desenvolvimento de técnicas avançadas para o estudo e caracterização dos fumos, que são um subproduto do processo de soldagem. Equipamentos e técnicas de última geração na área de aerossóis estão sendo utilizados para a coleta e caracterização em tempo real das partículas nanométricas que compõem estes fumos. Adicionalmente, técnicas de microscopia eletrônica de varredura (SEM) e transmissão (TEM), difração de raios-X (DRX) e espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS) estão sendo utilizadas para caracterizar a morfologia, estrutura cristalina e estados de valência das partículas que formam este fumos.

As técnicas de coleta e análise de dados e amostras foram desenvolvidas e testadas. Análises preliminares com fumos correspondentes a diferentes ligas metálicas como aços carbono e aços inoxidáveis foram desenvolvidas durante o primeiro semestre de 2004. Durante o segundo semestre do ano foram realizadas análises definitivas em fumos de soldagem correspondentes a diversos processos de soldagem e a aços de resistência média, aços de elevado teor de manganês e aços inoxidáveis. A primeira fase do projeto termina em janeiro de 2005 e já está sendo negociada a segunda fase do projeto durante a qual diversos outros fumos serão analisados utilizando as técnicas desenvolvidas durante a primeira fase.

Desenvolvimento de processos de brasagem para a produção de linhas de combustível de alta pressão

Trata-se de desenvolvimento conjunto com a Robert Bosch Brasil e o LNLS.

A Robert Bosch Ltda está localizada na cidade de Campinas-SP, é uma grande empresa multinacional dedicada à produção de peças para automotores, eletroeletrônicos e ferramentas entre outros. Esta empresa é líder a nível mundial no projeto e produção de modernos e eficientes sistemas de injeção de combustível para automóveis de alto padrão.

A sede brasileira desta empresa foi incumbida de projetar e produzir grandes séries de sistemas de injeção de alta pressão para suprir o mercado mundial. No segundo semestre de 2004 foi estabelecido o grupo de trabalho incluindo engenheiros e pesquisadores da BOSCH e do LNLS para a avaliação dos parâmetros de processo a ser utilizados na produção e teste de grandes séries destes componentes. A parceria LNLS-BOSCH permitiu que todo o trabalho de desenvolvimento desta linha de produtos esteja sendo inteiramente realizada no Brasil com uma participação mínima do departamento de pesquisa e desenvolvimento da BOSCH na Alemanha.

Aplicação de Grafite em Celas de Combustível - Novofilme

Durante o ano de 2004 foi realizada uma oficina em aplicações de grafite em sistemas de energia e térmicos financiado pelo Fundo Verde Amarelo (FVA) - CNPq. Esta oficina contou com a participação das empresas Novofilme, EMBRACO e Expresso Leão Mineradora, e das instituições UFMG, UNICAMP, USP-SC e LNLS. O objetivo básico desta oficina era o delineamento de projeto a ser submetido ao FVA em uma segunda fase tratando primariamente da utilização de grafite natural, proveniente de mina localizada na região do Ceará. Este projeto foi aprovado e será desenvolvido em 2005 e 2006.

Em síntese, este projeto está focalizado no processamento e Caracterização de Grafite Nanoestruturado para a construção de placas para células combustível a base de grafite. A Novofilme também utiliza sistema de raios-X, financiados pelo CNPq (CT-Energ), projeto aprovado no final de 2003.

Caracterização de Catalisadores - Oxiteno

A OXITENO SA Indústria e Comércio é uma empresa que atua nas áreas química e petroquímica e é a única produtora brasileira de óxido de eteno, etilenoglicólis, etanolaminas, éteres glicólicos e acetatos de éteres glicólicos e isetonato de sódio. Na cadeia petroquímica, a Oxiteno é uma empresa de segunda geração e atua também no desenvolvimento de novos catalisadores, para diferentes processos.

No segundo semestre de 2004, iniciaram-se discussões entre OXITENO e LNLS e teve início a elaboração de um projeto conjunto, visando a caracterização de catalisadores em desenvolvimento pela OXITENO. Caracterizações preliminares de algumas amostras foram realizadas por Microscopia Eletrônica de Transmissão de Alta Resolução. Para o início de 2005 está prevista a assinatura do convênio entre OXITENO e LNLS e de um primeiro termo aditivo, que prevê a caracterização de catalisadores por microscopia eletrônica.

5.2 - Serviços

Diversos serviços foram prestados para a indústria brasileira e para instituições no exterior durante o ano de 2004. Entre estes serviços cabe destacar os seguintes:

Construção de Combinadores de Potência de 200kW – Synchrotron SOLEIL-França

O síncrotron SOLEIL, atualmente em construção na França, será o mais moderno e completo laboratório de luz síncrotron do mundo, contará com uma máquina de 2,75 GeV, 354 m de circunferência e com 34 linhas de luz. O anel de armazenamento contará com 4 cavidades supercondutoras de RF, que serão alimentadas por 4 amplificadores de estado sólido de 353 MHz – 200kW.

Em outubro de 2004, o SOLEIL convidou o LNLS a participar na fabricação dos combinadores de potência, um dos elementos mais críticos dos amplificadores. Estes componentes coaxiais de 50 μ construídos em alumínio somarão a potência de dois amplificadores de 100 kW e serão construídos em 2005.

Deposição de filmes de dióxido de silício – Multibrás:

Foram realizadas deposições de filmes finos de dióxido de silício sobre chapas de aço inox, utilizados como tampo de fogões. O objetivo da deposição deste revestimento sobre o aço é o de aumentar a resistência do aço ao aquecimento produzido pelos queimadores a gás.

Desenvolvimento de processos de Fotogravação - OptoLink:

Foram realizados processos de fotogravação e corrosão em filmes espessos metálicos (níquel e ouro), crescidos por eletroformação sobre cerâmicas, para aplicações em micro-ondas e microeletrônica.

Para a realização de estudos de confiabilidade das estruturas de cobre sobre alumina foram preparadas uma série de amostras contendo níquel e cobre depositados por via química e eletrolítica respectivamente. A obtenção destas estruturas é feita utilizando o processo fotolitográfico seguido da corrosão química. A máscara utilizada possui 40 terminais em montagem tipo DIL (*dual in line*) disponível no Laboratório de Microfabricação.

As amostras foram entregues e os resultados desejados (reprodutibilidade e confiabilidade) pela Optolink foram obtidos.

Desenvolvimento de sensor de campo elétrico na faixa de 100KHz a 3GHz. - CPqD

Estes sensores utilizam estruturas baseadas em dipolos para a medição do campo elétrico. Para uma melhor eficiência do sensor, foram utilizados dipolos de material resistivo (nitreto de tântalo e níquel-cromo) sobre cerâmica. Este é um projeto conjunto entre o CPqD e o LNLS. Dois conjuntos de sensores foram entregues e já foram montados na eletrônica e encontram-se em fase de testes. A previsão é de instalação em campo no primeiro semestre de 2005.

Aplicação de Grafite em Celas de Combustível - Novocell

No final de 2004 a segunda fase do projeto foi aprovada. A assinatura de um convênio entre a Novocell e o LNLS possibilitou a contratação de um estagiário para participar no desenvolvimento de processos para a obtenção de moldes metálicos que serão utilizados na fabricação das placas de grafite. O primeiro molde metálico (níquel) com 30 µm de espessura já foi entregue.

Serviços de Análise de Materiais Mediante XPS – Centro Tecnológico da Marinha-SP:

Determinação da concentração de elementos e ligações químicas dos constituintes em amostras de fibras de carbono submetidas a diferentes tratamentos.

Serviços de Análise de Materiais Mediante Microscopia Eletrônica:

Foram realizadas análises de amostras de papel para RODHIA, aço para a PIRELLI, fraturas de peças metálicas fundidas para a VALEO, micro-componentes eletrônicos para ITAUTEC e componentes óticos para OPTOLINK.

Serviços de Consultoria

Foi realizada uma consultoria para a empresa COSAN SA Indústria e Comércio (um dos maiores produtores de açúcar e álcool do Brasil) com relação a falha de reparo de um gerador de vapor de grande porte localizado na unidade de Rafard-SP.

Colaborou-se com a EMBRACO na seleção e desenvolvimento de processos de união de materiais referentes a um novo compressor para refrigeradores. Também foi ministrado ao pessoal de pesquisa e desenvolvimento da EMBRACO um mini-curso de soldagem à laser aplicado à indústria de compressores.

Serviços de Produção de Instrumentação Científica

Em colaboração com a Universidade Federal da Bahia, foi desenvolvida e fabricada no LNLS uma câmara de vácuo de médio porte para experimentos científicos.

Em colaboração com o Laboratório de Colisões Atômicas e Moleculares do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro, está sendo fabricada uma câmara de amostras de médio porte para realização de experimentos científicos.

Foi produzido e vendido um conjunto de dois cristais de Ge para um monocromador do *Department of Chemistry, Louisiana State University, Baton Rouge, USA*.

Foi realizado para o Instituto de Pesquisas de Energia Nuclear - IPEN, um estudo viabilizando o projeto, construção e teste de estanqueidade de uma câmara de vácuo, para experimentos com lasers de alta intensidade.

5.3 - Visitas de Promoção do LNLS e Outras Atividades

Foram realizadas visitas às empresas Villares Metals em Sumaré-SP, CENPES-Petrobrás no Rio de Janeiro-RJ e EMBRACO em Joinville-SC e GERDAU em Charqueadas-RS. Duas visitas foram realizadas no CENPES buscando interações na área de catálise e materiais. Na segunda visita foi ministrado um seminário sobre as possibilidades de pesquisa de desenvolvimento no LNLS. Na visita à Embraco foi ministrado um curso de soldagem a laser de metais e polímeros. Na visita à GERDAU foram mantidas conversações para estabelecer um acordo de cooperação tecnológica e científica GERDAU-LNLS, documentos oficiais de intenção de cooperação em um projeto envolvendo simulação física de materiais já foram emitidos por ambas entidades.

O LNLS participou do *Brazil-US Technology Open House* que foi realizado no NIST na cidade de Washington D.C. em julho de 2004.

5.4 - Patentes

Em 22 de junho a ABTLuS protocolou o pedido de patente “Célula eletroquímica para estudos de raios-X *in-situ*”, tendo como inventores Noêmia Watanabe, Milton C. Rocha, Edilson Tamura e Maria do C. M. Alves, com o número PI 0400677-1.

A invenção refere-se a um novo dispositivo destinado a estudos de caracterização de amostras, que possibilita o acompanhamento da evolução das propriedades estruturais e eletrônicas durante uma reação eletroquímica, como por exemplo, as reações de carga e descarga de baterias de lítio, reações eletrocromáticas em janelas ópticas, reações eletrocatalíticas, entre outros. Estes estudos auxiliam na elucidação dos mecanismos reacionais envolvidos nos processos de síntese e na descoberta do tipo de interação química existente nos materiais fabricados, fatores estes que determinam as propriedades físico-químicas dos produtos obtidos.

6. Informação, Educação e Divulgação

6.1 - Informação Científica e Administrativa

Biblioteca

A gestão do acervo e de empréstimos da Biblioteca foi automatizada com a implantação e customização do módulo RM Biblios do Sistema de Gestão Administrativa (RM Corpore). Formulários de Consulta ao acervo e aplicativo de auto-empréstimo foram desenvolvidos no ambiente *web*. A biblioteca conta hoje com um acervo de 5.524 livros, assina 61 títulos de periódicos estrangeiros, sendo 26 com acesso eletrônico, 18 títulos de periódicos nacionais, e, por meio do MCT, possibilita o acesso ao Portal Periódicos da CAPES.

Informática e Internet

Nas atividades de melhoramentos da infra-estrutura de Informática, foram realizados investimentos em melhorias de *hardware* das estações de trabalho e dos servidores SGI da Sala de Estações de Trabalho (SET). No escopo deste projeto também ocorreram investimentos para a reestruturação da rede de dados que passou a operar em GigaBit Ethernet, rearranjo da disposição física das estações e instalação de *no-break* para os servidores. Em atendimento às recomendações de auditoria externa independente, foi montado na Sala da Informática um Data Center para a hospedagem de servidores de missão crítica. O Data Center provê recursos de climatização, rede de dados homologada e gerenciamento remoto.

Para atender a demanda por novas conexões de rede no *campus* do LNLS foi necessária a criação de uma nova topologia de rede baseada em endereçamento IP (Internet Protocol) privado com tradução para as conexões com a Internet, denominado “Rede 10”. Desta forma a capacidade da rede de dados foi ampliada do limite de 512 estações para aproximadamente 64.000 estações teóricas. Outros benefícios da “Rede 10” foram o aumento do nível de segurança dos dados e a possibilidade de migração para novos provedores de Internet (ISP). Para prover aos pesquisadores o acesso remoto aos recursos da rede do LNLS, foi criado o serviço de “Rede Virtual do LNLS – VPN”, que de forma segura oferece aos operadores da fonte de luz síncrotron a intervenção à distância a vários sistemas utilizando qualquer acesso da Internet em banda larga.

O LNLS se qualificou como unidade usuária do *backbone* RNP2 que disponibiliza recursos e serviços avançados da Internet e da Internet2, sendo estas redes operadas pela RNP (Rede Nacional de Ensino e Pesquisa). No âmbito deste projeto, a banda de comunicação do LNLS com a Internet acadêmica e comercial será ampliada dos atuais 10 Mbps para 34 Mbps.

Para otimizar o acesso a Internet e permitir auditoria de uso, foi instalado servidor Proxy de controle de acesso e de armazenamento temporário de *sites*. O sistema de *firewall* do campus e das instalações da Sala de Operação da fonte de luz síncrotron, baseado em software livre, ampliaram a segurança da rede contra ataques externos e uso malicioso.

Para suprir o aumento na demanda de requisições de uso dos aplicativos e formulários dinâmicos em produção na página da Intranet e Extranet do LNLS, foi instalado novo servidor de aplicações Web (Pegasus) com upgrade de sistema operacional Microsoft®.

Projeto Giga “Organização Virtual” – RNP/FINEP

Aprovação e contratação do sub-projeto “organização virtual” no âmbito do Projeto GIGA/RNP/FINEP. O LNLS em parceria com o LNCC (Laboratório Nacional de Computação Científica) iniciou a construção de arquitetura de uma *grid* computacional formada por *cluster* com 8 estações de alto desempenho. As aplicações científicas em bioinformática serão compartilhadas entre os pesquisadores do LNLS e do LNCC sobre um *test-bed* formado por uma conexão de alta velocidade -4Gbps.

Melhoramentos na Home-Page

Desenvolvimento de software de Gerenciamento de Conteúdo com recursos para possibilitar que usuários não-técnicos publiquem de forma fácil e organizada, textos, artigos, relatórios, arquivos, fotos e gráficos na página do LNLS.

Sistemas de Informação

Ao sistema de Gerenciamento de Eventos foi integrado um módulo de comércio eletrônico para pagamento on-line de inscrições com cartão de crédito e emissão de boleto bancário.

Para melhorar a gestão do Alojamento do LNLS foi adquirido software de administração hoteleira com banco de dados baseado em software de uso livre. O sistema automatizou tarefas de rotina da Secretaria para hospedagem, controle financeiro, agendamento de manutenção das unidades e integração com sistema telefônico para tarifação.

Para o controle e automação da operação da Rede Nacional de Materiais Nanoestruturados via Intranet e Extranet foi desenvolvido módulo no sistema de Gestão Administrativa (RM Corpore®). O sistema de Gerenciamento de Custos do LNLS passou a ser integrado ao Sistema de Convênios e Auxílios.

Os analistas de sistemas passaram por treinamento e capacitação em ambiente de desenvolvimento de sistemas com metodologia de formulação de requisitos para melhoria da qualidade de software, processo de modelagem unificado de sistemas (UML), engenharia de software em camadas baseada no modelo MVC (*Model-View-Controller*), linguagem de programação *Java* e *framework* de persistência de dados (*Hibernate*).

Melhorias na Rede de Voz – Sistema de Telefonia

Foram contratadas novas operadoras para telefonia fixa e celular, com serviços e tarifas mais adequados ao perfil da instituição. As motivações que

levaram a estas modificações incluem a necessidade de tornar mais eficiente a comunicação interna e, em especial, melhorar a capacidade de atendimento aos usuários e fornecedores do LNLS. O novo sistema de telefonia terá serviços de DDR Digital (Discagem Direta a Ramal), Correio de Voz, Terminais Digitais, Sistema Automatizado de Tarifação por Ramal e outras facilidades operacionais.

6.2 - Educação e Produção Científica

Com relação à produção técnico-científica foram registrados no banco de dados 177 artigos em periódicos indexados pelo *Institute For Scientific Information/Thomson Scientific – ISI*, publicados durante o ano de 2004, utilizando as instalações do LNLS.

Do total de 177 artigos publicados em 2004, 77 foram realizados com a participação de pelos menos um pesquisador do quadro do LNLS - Tabela 9, resultando na média de 3,3 publicações por pesquisador (ver comentários em Indicadores de Desempenho - pág. 65).

A evolução atualizada do número total de publicações com uso das instalações do LNLS pode ser observada no Gráfico 13.

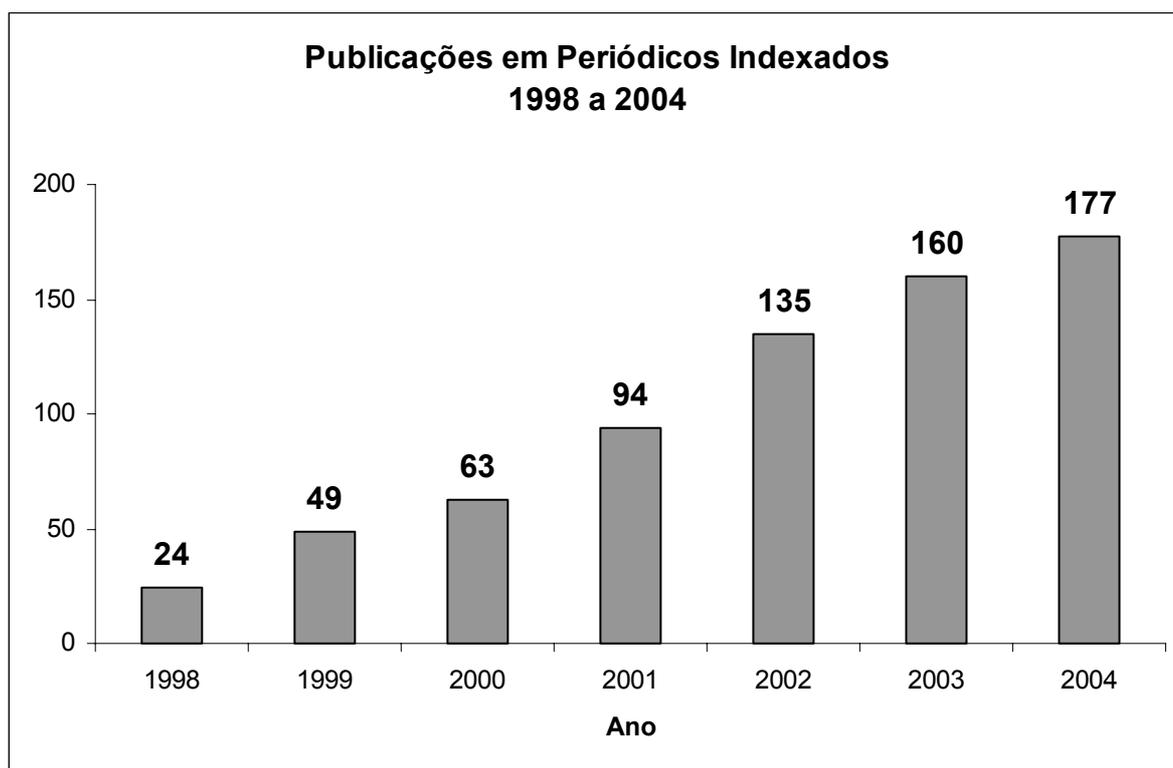


Gráfico 13: Evolução das publicações em periódicos indexados

Pode-se observar a evolução constante no número de publicações. Entretanto deve-se considerar as dificuldades de captação das informações.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

A Tabela 9 relaciona os pesquisadores do quadro da ABTLuS em atividade durante o ano de 2004.

Qtd.	Nome	Observações
1	Alberto Spisni	
2	Aline Yvette Ramos	
3	Antonio José Ramirez Londono	
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	Associado/Unicamp
10	Daniela Zanchet N. Cruz	
11	Eduardo Granado Monteiro da Silva	Associado/Unicamp
12	Francisco Javier Medrano	
13	Flávio Garcia	
14	Gilberto Medeiros Ribeiro	
15	Gustavo de Medeiros Azevedo	
16	Harry Westahl Junior	
17	Hélio César Nogueira Tolentino	
18	Igor Polikarpov	Associado/USP-SC
19	Iris Concepcion Linares de Torriani	Associado/Unicamp
20	João Alexandre Ribeiro G. Barbosa	
21	Jörg Kobarg	
22	José Antônio Brum	
23	Nilson Ivo Tonin Zanchin	
24	Pedro Fernandes Tavares	
25	Richard Landers	Associado/Unicamp
26	Rogério Magalhães Paniago	Associado/UFGM
27	Sérgio Teixeira Ferreira	Associado/UFRJ

Tabela 9: Pesquisadores da ABTLuS

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

Durante o ano de 2004, um total de 82 estudantes estiveram sob a orientação dos pesquisadores da ABTLuS, sendo 33 de iniciação científica, 5 projetos de bolsas técnicas, 6 de mestrado e 38 de doutorado, mantendo uma taxa de 1,9 pós-graduandos por pesquisador. Foram supervisionados 16 pós-doutores durante o ano.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

QUANT.	PÓS - GRADUANDOS	FUNÇÃO	CURSOS	INSTITUIÇÃO GRADUAÇÃO	INSTITUIÇÃO POS GRADUAÇÃO
1	ALEXANDRE JOSE CHRISTINO QUARESMA	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
2	AMANDA ABDALLA VALERIO	DOUTORADO	FARMÁCIA BIOQUÍMICA	UNIP	UNICAMP
3	ANA OLIVIA TIROLI	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
4	ANITA PAULA TESTA SALMAZO	MESTRADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	PUCAMP	UNICAMP
5	ANTONIO CARLOS TORREZAN DE SOUSA	MESTRADO	ENGENHARIA ELÉTRICA	UNICAMP	UNICAMP
6	BEATRIZ SANTOS CAPELA ALVES	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
7	BRUNO UCHOA BARBOZA	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
8	CARLA AZIMONTE	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
9	CEDRIC HESLING	MESTRADO	BIOLOGIA	Univ. Blaise Pasccal	UNP- FRANÇA
10	CINTHIA PIAMONTEZE	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
11	CRISTIANO LUIS PINTO DE OLIVEIRA	DOUTORADO	FISICA APLICADA	UNICAMP	UNICAMP
12	DARIO OLIVEIRA DOS PASSOS	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
13	DENISE BASSO NAKABAYASHI	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
14	EDMILSON RUI	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
15	ELVIS LIRA DA SILVA	MESTRADO	FÍSICA	UFMT	UNICAMP
16	EURIPEDES DE ALMEIDA RIBEIRO JUNIOR	DOUTORADO	ENG. AGRÔNOMICA	UFV	UNICAMP
17	FABIO CUPRI RINALDI	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
18	FELIX GUILHERMO GONZALEZ HERNANDEZ	DOUTORADO	FISICA	UCR - Costa Rica	UNICAMP
19	FLAVIA CRISTINA NERY	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UFMG	UNICAMP
20	FLAVIA RAQUEL GONÇALVES CARNEIRO	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UERJ	UNICAMP
21	JOSE MARCELO VARGAS	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
22	JULIO CESAR BORGES	DOUTORADO	FARMÁCIA	UFMG	UNICAMP
23	KELLY SANTOS	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UFSC	UNICAMP
24	LETICIA KHATER	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
25	MARCELA HERNANDEZ JIMENEZ	DOUTORADO	FISICA	UCR - Costa Rica	UNICAMP
26	MARCELO JUN MURAI	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
27	MARINA MARQUES TEIXEIRA VANINI	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
28	MARINA SOARES LEITE	DOUTORADO	QUÍMICA	UFPE	UNICAMP
29	MAYA PAOLA CERRO VERGARA	DOUTORADO	FISICA	UNIANDRES-Colômbia	UNICAMP
30	NARCIZO MARQUES DE SOUZA NETO	DOUTORADO	FISICA	UFPB	UNICAMP
31	NATALIA PRADO DE ABREU	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
32	ODALYS GARCIA CABRERA	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
33	PABLO ROBERTO FERNANDEZ SILES	MESTRADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
34	PATRICIA PEREIRA COLTRI	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
35	PATRICIA RIBEIRO DE MOURA	DOUTORADO	QUÍMICA	UNICAMP	UNICAMP
36	RAQUEL APARECIDA DE SOUZA	MESTRADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
37	RAUL ANDRES CERNADAS	DOUTORADO	BIOTECNOLOGIA	Univ.Sta. Fé-Argentina	UFSCAR
38	ROSICLER LAZARO BARBOSA	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
39	SANDRA MARA NARESSI SCAPIN	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
40	THAIS HALINE VAZ	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
41	THIAGO CARLOS CAGLIARI	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
42	THIAGO PEDRO MAYER ALEGRE	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
43	TULIO COSTA RIZUTTI DA ROCHA	DOUTORADO	FISICA	UNICAMP	UNICAMP
44	WILIAM CESAR BENTO REGIS	DOUTORADO	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UFMG	UFMG

Tabela 10: Estudantes de pós-graduação realizando suas teses no LNLS

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**Relatório Anual de 2004**

A Tabela 11 relaciona os pós-doutores sob supervisão no LNLS durante o ano de 2004.

ORD.	POS-DOCTORES	CURSO	INSTITUIÇÃO GRADUAÇÃO	INSTITUIÇÃO POS GRADUAÇÃO
1	CAROLINE RIBEIRO DE BORJA OLIVEIRA	FARMÁCIA	UNISANTOS	UNICAMP
2	ELIANA GUEDES STEHLING	FARMÁCIA BÍOQUÍMICA	UFPB	UNICAMP
3	ELIANA MARIA ASSMANN	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UFRGS	UNICAMP
4	ESTEBAN DAMIAN AVENDANO SOTO	ENGENHARIA MECÂNICA	Univ. Costa Rica	UPPSALA
5	EVALDO RIBEIRO	FÍSICA	UNICAMP	UNICAMP
6	HENRIQUE FERREIRA	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
7	JUAN CARLOS GONZALEZ PEREZ	FÍSICA	UH - CUBA	UNICAMP
8	LEANDRA WATANABE	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNESP	UNESP
9	LJUBICA TASIC	QUÍMICA	BU - Iugoslávia	UNICAMP
10	LUCIA HELENA COUTINHO	FÍSICA	UNICAMP	UNICAMP
11	MANOEL GUSTAVO PETRUCCELLI HOMEM	FÍSICA	UFSCAR	USP
12	MARCIA REGINA SOARES	FÍSICA	UFRJ	UFRJ
13	MAURICIO LUIS SFORÇA	QUÍMICA	UNICAMP	UNICAMP
14	SCHEILA FURTADO BRAGA LLANES	FÍSICA	UNI.FED.JUIZ DE FORA	UNICAMP
15	SERGIO OYAMA JUNIOR	CIÊNCIAS BIOLÓGICAS	UNICAMP	UNICAMP
16	THELMA DE AGUIAR PERTINHEZ	QUÍMICA	UNG	U.O - UNIV. OXFORD

Tabela 11: 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 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 questionável quanto à formação de novos pesquisadores devido a perda de diversidade na sua formação, e quanto às instituições em geral, devido a perda de dinamismo na troca de conhecimentos e não é apoiado no LNLS.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

Em 2004 foram realizados 8 cursos, 1 mini-curso e 1 oficina detalhados na Tabela 12.

Título	Responsável	Período	Local	Qtd.
Cristalografia de Proteínas	Francisco Javier	17 a 19/03	Fortaleza	25
Cristalografia de Proteínas	Francisco Javier	22 a 24/03	Natal	28
Introdução a técnicas experimentais no LNLS (curso de pós graduação Unicamp)	Eduardo Granado	05/03 a 16/07	Campinas	20
Oficina de Aplicações de Luz Síncrotron e Microscopias em Catálise Heterogênea	Daniela Zanchet Daniel Ugarte Richard Landers	14 a 15/06	Campinas	44
Cristalografia de Proteínas	Francisco Javier	21 a 23/06	Campinas	19
V Escola de Inverno em Sistemas Nanoestruturados (Rede Nano)	Daniela Zanchet	14/7	Campinas	28
Clonagem, Expressão e Purificação de Proteínas: Curso teórico e prático (pós-graduação Unicamp)	Jörg Kobarg	30/7	Campinas	14
Estudo de Proteínas por Espectroscopia (ReNaBiMe)	Carlos Ramos	15 a 17/09	Campinas	16
Técnicas Avançadas de Análise de Dados de XAS	Gustavo Azevedo	16 a 17/09	Campinas	23
Curso de Espectrometria de Massas (Treinamento para utilização de equipamento)	Fábio Gozzo	20/9	Campinas	22
Mini-curso de Física e Engenharia de Fontes de Luz Síncrotron, como parte do III Simpósio Brasileiro de Engenharia Física	Liu Lin, James Piton, Cleber Rodrigues, Marcelo Juni e Marcos Raulik	29/10	São Carlos	15
Curso Avançado de Cristalização de Proteínas	Beatriz Gomes Guimarães	02/12 à 03/12	Campinas	23

Tabela 12: Cursos realizados em 2004

No primeiro semestre de 2004, o LNLS em parceria com a UNICAMP, promoveu pelo 2º ano consecutivo o curso eletivo denominado “Introdução às Técnicas Experimentais no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron” para 20 alunos de graduação dos cursos de Física, Química e Biologia da UNICAMP.

Outro curso oferecido pelo o LNLS foi o de Introdução à Soldagem dos Aços Inoxidáveis, realizado no período de 25 de março a 15 de abril, para aproximadamente 41 participantes, motivado pela reformulação do programa de interação com o setor industrial.

O LNLS também colaborou para a realização do *The First Latin American Protein Society Meeting* que contou com a participação de mais de 300 pesquisadores.

Por fim, foram realizados 93 seminários, sendo 7 por pesquisadores estrangeiros e 86 por pesquisadores brasileiros, além de 2 colóquios.

7. Gestão e Planejamento

O 11º Termo Aditivo foi assinado apenas em 19 de abril de 2004 e os repasses relativo ao ano de 2004 ocorreram somente em 10 de maio de 2004. O laboratório manteve, mesmo nos primeiros meses do ano, o ritmo normal de trabalho, utilizando para isto as suas reservas financeiras operacionais. Apenas os investimentos de maior porte tiveram seu início adiado até a assinatura do Termo Aditivo.

Além dos recursos destinados às atividades relacionadas à Pesquisa, Desenvolvimento e Aplicação de Luz Síncrotron, no montante de R\$ 16,1 milhões, o Aditivo de 2004 contemplou recursos para Pesquisa e Desenvolvimento em Biologia Molecular Estrutural, no montante de R\$ 2,6 milhões, para Desenvolvimento de Pesquisa da Rede Nacional de Proteoma, no montante de R\$ 750 mil e para Apoio a Redes e Laboratório de Nanotecnologia, no montante de R\$ 2 milhões, totalizando o valor de 21,4 milhões. Estes valores recompõem a tendência histórica do orçamento da ABTLuS, levando em conta o aumento de despesas operacionais devido ao aumento de custo dos insumos e também devido ao crescimento do laboratório.

As responsabilidades de prestação de contas previstas no Contrato de Gestão foram atendidas pela ABTLuS. As demonstrações financeiras relativas ao ano de 2003 foram publicadas no Diário Oficial da União e no Jornal da Ciência, assim como o parecer dos Auditores Independentes. O Relatório Anual de Gestão de 2003 está disponível na página do LNLS. A Controladoria-Geral da União do Estado de São Paulo concluiu os trabalhos de auditoria atestando a regularidade com ressalvas de sua prestação de contas e medidas específicas foram adotadas para melhoria dos controles internos e atendimento das recomendações dessa auditoria.

Os indicadores de gestão pactuados por meio do 11º Termo Aditivo foram revistos pela Comissão de Acompanhamento e Avaliação do Contrato de Gestão para o presente exercício.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

7.1 – Relatório Financeiro

A evolução e composição do orçamento da ABTLuS podem ser observadas no Gráfico 14:

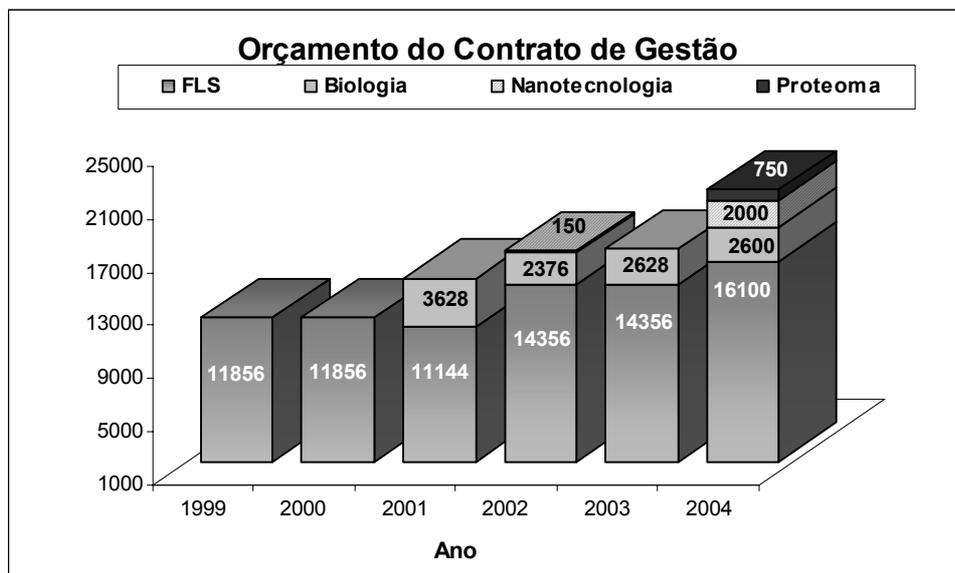


Gráfico 14: Orçamento do Contrato de Gestão ABTLuS. Estão incluídos R\$ 855 mil que ainda não foram executados, estando como restos a pagar.

O fluxo de repasses dos recursos do Contrato de Gestão do Orçamento de 2004 foi irregular no ano, como pode ser constatado no Gráfico 15. No início do semestre de 2004 foi repassado na totalidade o valor correspondente ao resto a pagar do ano de 2003, de R\$ 1,9 milhões.

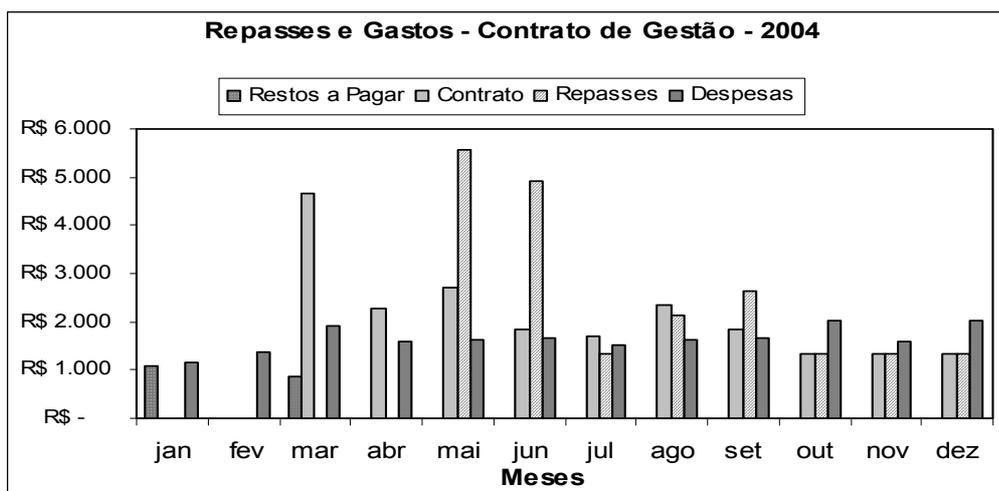


Gráfico 15: Repasses e gastos do período de 2004

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**Relatório Anual de 2004**

As fontes de receitas da ABTLuS durante o ano de 2004 foram principalmente recursos do Contrato de Gestão (inclusive o resto a pagar de 2003), recursos de Agências de Fomento, dos Fundos Setoriais e provenientes de vendas de serviços e rendimentos de aplicações financeiras, como pode ser observado na Tabela 13.

(R\$1.000,00)

Receitas e Despesas - ABTLuS	2004	%
Receitas	<u>36,163</u>	100%
Contrato de Gestão	<u>22,550</u>	62%
Orçamento 2003	1,955	
Fonte de Luz Síncrotron	15,245	
Biologia Molecular Estrutural	2,600	
Proteoma	0,750	
Nanotecnologia	2,000	
Outras Fontes	<u>13,613</u>	38%
Vendas, receitas financeiras e outras	2,535	
Pessoal CNPq e Bolsas	2,039	
Agências de Fomento	9,039	
Despesas	<u>R\$ 35,019</u>	100%
Despesas Correntes	<u>R\$ 21,302</u>	61%
Pessoal	<u>R\$ 12,581</u>	
ABTLuS	10,542	
Pessoal CNPq e Bolsas	2,039	
Materiais e serviços	11,667	
Equipamentos fabricados no LNLS ^a	(2,946)	
Investimentos	<u>R\$ 13,717</u>	39%
Edificações e equipamentos	4,678	
Agências de Fomento	9,039	
Resultado do período	<u>R\$ 1,144</u>	

^a Recursos destinados a construção de equipamentos classificados como Investimentos

Tabela 13: Recursos Totais da ABTLuS

Cumprе ressaltar que os recursos provenientes de Agências de Fomento, em sua maioria, referem-se à entrada do equipamento na ABTLuS e não à doação ou incorporação ao seu patrimônio.

Os gastos com pessoal durante o ano de 2004 representaram 35% dos recursos totais do período. O perfil do quadro funcional do LNLS pode ser observado no Gráfico 16:

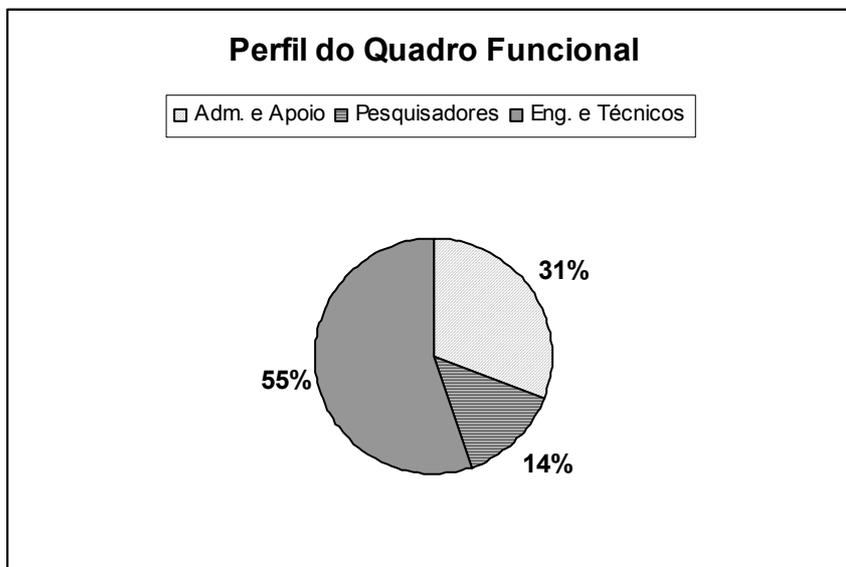


Gráfico 16: Perfil do Quadro Funcional do LNLS

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

C. INDICADORES DE DESEMPENHO

Macro - Objetivo	Indicador	MO	Unid.	Tipo	Peso	Pactuado 2004	Realizado 2004
Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.	1. Número de horas - linha	1	U	D	2	45.000	39.909
	2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron	1	U	D	2	3.800	3.514
	3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)	1	%	D	3	93%	93%
	4. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron	1	%	D	3	90%	111%
	5. Horas de estudo de máquina e comissionamento	1	U	D	2	1.400	3.494
	6. Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron	1	%	Uso	2	70%	93%
	7. Custo por proposta de pesquisa realizada nas instalações abertas	1	R\$	D	2	70.000	59.658
	8. Número de propostas realizadas nas instalações abertas	1	U	Uso	3	470	587
	9. Índices de satisfação dos usuários	1	%	D/Uso	2	85%	93%
	10. Número total de publicações	1	U	Uso	3	150	177
Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo.	11. Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS	2	Rz	D	2	2,5	3,3
	12. Taxa de supervisão de pós-graduados	2	Rz	D	2	1,5	1,9
	13. Taxa de supervisão de pós-doutores	2	Rz	D	3	1,0	0,7
	14. Números de memorandos técnicos disponíveis na internet	2	U	D	2	10	6
Implantar e gerir a infraestrutura da ABTLuS visando ganhos de eficiência e eficácia mediante novos mecanismos de gestão e informação e difusão de Ciência, Tecnologia e Inovação.	15. Número de projetos de desenvolvimento tecnológico	3	U	Uso	2	5	6
	16. Número de técnicos externos treinados	3	U	D	2	25	7
	17. Número de pesquisadores externos treinados	3	U	D	3	250	277
	18. Horas de treinamento por funcionário	3	U	D	1	20	26
	19. Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão	3	%	D	2	30%	60%

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

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

As análises dos resultados apresentados no quadro de indicadores do ano de 2004 estão descritas a seguir:

1 – Número de horas linha

Previsto: 45.000 horas linhas

Realizado: 39.909 horas linhas

Em 2004 foram fornecidas 3.514 horas de feixe para usuários de luz síncrotron em 12 linhas de luz, totalizando 39.909 horas de experimento. Apesar da operação em regime contínuo (24 horas por dia, de segunda-feira à sexta-feira no primeiro semestre e de segunda-feira à sábado no segundo semestre), o número de horas fornecidas ficou aquém do inicialmente programado em função da necessidade de interromper a operação para usuários no mês de junho para o término do comissionamento do sistema de RF.

No mês de setembro de 2004, a fonte de luz síncrotron operou em dois modos de operação, o modo “*Multi Bunch*” e o modo especial “*Single Bunch*”, de interesse para experimentos com resolução temporal. Neste ano o modo “*Single Bunch*” esteve disponível para operação de 3 linhas de luz (SXS, TGM e SGM). Foram fornecidas 251 horas de feixe nesse modo de operação.

Apesar da inclusão dos sábados a partir de julho, no tempo de operação para usuários não foi possível recuperar o tempo perdido com a parada de junho e o número de horas oferecidas ficou aquém do previsto.

Fórmula de cálculo:

[Linhas de luz * total de horas de feixe]

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

Período	Horas em Operação	Linhas em Operação	Total de Horas Linhas
Janeiro	377	12	4.524
Fevereiro	287	12	3.444
Março	499	12	5.988
Abril	334	12	4.008
Maio	416	12	4.992
Junho	62	12	744
Julho	609	12	7.308
Agosto	446	12	5.352
Setembro	233	12	2.796
Horas no Modo Multi-Bunch			39.156
Setembro	251	3	753
Horas no Modo Single-Bunch			753
Total de Horas Disponíveis			39.909

2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron

Previsto: 3.800 horas

Realizado: 3.514 horas

Durante o ano de 2004 foram fornecidas 3.514 horas de feixe para usuários de luz síncrotron, sendo 3.464 horas durante o horário programado (horas entregues) e 50 horas em turnos extraordinários. Em função da parada emergencial de Junho o número total de horas programadas foi reduzido a 3.747 horas. Com o reagendamento de horários do segundo semestre foi possível repor parte considerável do tempo de feixe para os usuários, ainda que a meta inicial não tenha sido integralmente atingida.

Fórmula de cálculo:

[número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron]

3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)

Previsto: 93%

Realizado: 93%

O resultado obtido está de acordo com o pactuado. O nível apresentado de confiabilidade foi consequência das instabilidades observadas devido ao segundo sistema de RF que comprometeram a confiabilidade da máquina. Em função das intervenções realizadas em junho no sistema de RF houve uma sensível melhora da confiabilidade da fonte no segundo semestre, chegando a 96%.

Fórmula de cálculo:

[horas entregues no tempo programado/horas previstas]

4 – Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron

Previsto: 90%

Realizado: 111,4%

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 produzindo o fluxo luminoso esperado.

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 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 de cálculo:

{[(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	252 mA	250	3
Corrente Média	172 mA	163	5
Tempo de Vida Médio	17 h	10	1

$$\text{Ind. 4} = \{[(252/250)*3] + [(172/163)*5] + [(17/10)*1]\} / 3+1+5 = 111,4\%$$

O resultado do aumento significativo do tempo de vida do feixe e da corrente média no anel foram em função do novo sistema de RF. O indicador de Desempenho não reflete os efeitos negativos causados pelas instabilidades do feixe, que tiveram impacto considerável sobre o número de horas de estudos de máquina (ver Indicador 6), assim como sobre a confiabilidade.

5 – Horas de estudo de máquina e comissionamento

Previsto: 1.400 horas

Realizado: 3.494 horas

Este é um novo indicador pactuado para o ano de 2004. Os problemas de instabilidade do feixe de elétrons decorrentes da instalação da nova cavidade de RF demandaram um tempo considerável de estudo de máquina para serem solucionados, impactando o indicador. Esses problemas não haviam sido previstos tendo em vista as experiências positivas que foram as duas instalações anteriores de cavidades de RF no anel de armazenamento. 2.317 horas foram contabilizadas como horas de estudo de máquina ainda que tenha sido incluído no cômputo o tempo demandado para o comissionamento do sistema de RF. No segundo semestre foram contabilizadas 1.177 horas no comissionamento da fonte de luz após as intervenções realizadas ao longo dos três últimos meses do ano.

Fórmula de cálculo:

[Total de horas dedicadas a estudos de máquina e comissionamento]

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

Previsto: 60%

Realizado: 93%

O indicador considera a capacidade de ampliação do tempo de operação da fonte de luz síncrotron. O alto grau de saturação foi resultante do grande número de horas utilizadas em estudos de máquina no primeiro semestre, e ao tempo utilizado na operação aos sábados e para instalações e comissionamento da máquina no segundo semestre.

Fórmula de cálculo:

[1-(horas de máquina desligada)/total de horas no ano]

Memorial de Cálculo:

Uso da Fonte de Luz Síncrotron	Total Horas
Usuários	3514 h
Injeção	138 h
Estudo de Máquina	2317 h
Manutenção	752 h
Comissionamento	1177 h
Falhas	283 h
Total em uso	8181 h
Horas disponíveis	8784 h
Grau de Saturação	93%

Ind. 6 = $(3514 + 138 + 2317 + 752 + 1177 + 283) / (366 \text{ d} * 24 \text{ h}) = 93\%$

7 – Custo por proposta de pesquisa realizada nas instalações abertas

Previsto: R\$ 70.000,00

Realizado: R\$ 59.658,58

Os gastos totais do período mantiveram-se dentro do esperado, em torno de R\$ 35,0 milhões, considerando os investimentos realizados com recursos de outras fontes e do Contrato de Gestão. Entretanto, a superação no atendimento de número de propostas no período reflete positivamente na redução do custo por proposta de pesquisa realizada.

Fórmula de cálculo:

[Gastos totais / indicador 8]

8 – Número de propostas realizadas nas instalações abertas

Previsto: 470 propostas realizadas

Realizado: 587 propostas realizadas

Foram realizadas 587 propostas de pesquisa durante o primeiro semestre, sendo 379 nas linhas de luz, 150 no Laboratório de Microscopia Eletrônica, 18 no Laboratório de Microfabricação, 16 no Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento, 20 no Laboratório de Espectroscopia de Massa e 4 do Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear. Não estão incluídos os projetos desenvolvidos no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear associados às Redes Nacional e Estadual de Biologia Molecular Estrutural. O maior número de propostas realizadas em relação ao pactuado deve-se a efetivação de várias instalações (AFM, Espectrometria de Massas) como instalações abertas, além de uma intensificação nas outras instalações.

Fórmula de cálculo:

[número de propostas realizadas]

9 – Índices de satisfação dos Usuários

Previsto: 85%

Realizado: 93%

O indicador é baseado no questionário do “Ombudsperson” respondido pelo usuários da infra-estrutura do LNLS, onde são destacados os seguintes itens: qualidade da fonte de luz síncrotron e do apoio técnico e qualidade de apoio administrativo.

Fórmula de cálculo:

{[(Dentro do esperado e/ou Além do esperado nos itens Qualidade e Apoio Técnico)*peso]+[Dentro do esperado e/ou Além do esperado no item Qualidade de apoio administrativo)*peso]}

10 – Número total de publicações

Previsto: 150 artigos periódicos indexados

Realizado: 177 artigos periódicos indexados

Foram publicados um total de 177 artigos em periódicos indexados pelo *Institute For Scientific Information/Thomson Scientific - ISI*. A atualização do banco de dados da produção bibliográfica depende principalmente da informação do próprio pesquisador, apesar de todo esforço para captação dessas informações, esta pode ter uma margem de erro não desprezível.

Fórmula de cálculo:

[Total de publicações em periódicos indexados]

11 – Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS

Previsto: 2,5 artigos por pesquisador interno

Realizado: 3,3 artigos por pesquisador interno

Durante o ano de 2004 foram publicados 77 artigos em periódicos indexados por pesquisador da ABTLuS. Para efeito de cálculo do indicador, considera-se o artigo em periódicos indexados que tenha o nome do pesquisador da ABTLuS, como um dos autores.

Fórmula de cálculo:

[Publicações de pesquisadores ABTLuS/número de pesquisadores da ABTLuS]

12 – Taxa de Supervisão de pós-graduados

Previsto: 1,5 pós-graduando sob orientação por pesquisador

Realizado: 1,9 pós-graduando sob orientação por pesquisador

Estiveram sob orientação, no período, 44 alunos de pós-graduação. O indicador é obtido pela razão dos pós-graduandos orientados pelo número de pesquisadores vinculados à ABTLuS.

Fórmula de cálculo:

[Total de pós-graduados orientados/total de pesquisadores ABTLuS]

13 – Taxa de Supervisão de pós-doutores

Previsto: 1,0 pós-doutores supervisionados

Realizado: 0,7 pós-doutores supervisionados

Estiveram sob supervisão, no período, 16 pós-doutores. O indicador é obtido pela razão dos pós-doutores supervisionados pelo número de pesquisadores vinculados à ABTLuS. Continuamos intensificando a busca de pós-doutores. Está em consideração a criação de uma posição de pós-doutor dentro do quadro de

funcionários da ABTLuS para melhorar a absorção de pós-doutores, essencial para a vida do laboratório.

Fórmula de cálculo:

[Total de pós-doutores orientados/total de pesquisadores ABTLuS]

14 – Números de Memorandos Técnicos disponíveis na internet

Previsto: 10

Realizado: 6

Seis Memorandos Técnicos foram produzidos e disponibilizados na internet durante o ano de 2004. Ainda não podemos dizer se o valor pactuado é elevado ou se é necessário intensificar os registros dos trabalhos realizados. O indicador continua em análise.

Fórmula de cálculo:

[Total de memorandos técnicos no *website* do LNLS]

15 – Número de projetos de desenvolvimento tecnológico

Previsto: 5 projetos de desenvolvimento tecnológico

Realizado: 6 projetos de desenvolvimento tecnológico

Os 6 projetos de desenvolvimento tecnológico realizados no ano de 2003 foram os projetos com a HP e GETEC, iniciados em anos anteriores, e quatro novos projetos iniciados este ano, com a Companhia D&L Welding fumes Analysis, com a Empresa Novofilme - V S Ferreira Consultoria, Robert Bosch Ltda e Oxiteno S.A, devidamente explicitados no Programa de Interação com o Setor Industrial.

Fórmula de cálculo:

[Total de projetos realizados]

16 – Número de técnicos externos treinados

Previsto: 25 técnicos treinados

Realizado: 7 técnicos treinados

Com o encerramento do Programa de Estágio de Ensino Médio implementado em 2002 foram treinados apenas 7 estagiários de nível médio no ano de 2004. Esta atividade passará por um estudo aprofundado visando melhorar o desempenho do laboratório.

Fórmula de cálculo:

[Número de técnicos treinados]

17 – Número de pesquisadores externos treinados

Previsto: 250 pesquisadores treinados

Realizado: 277 pesquisadores treinados

No ano de 2004 foram realizados dez cursos, um mini-curso e uma oficina direcionada para área de catálise, tendo sido treinados 277 pesquisadores. A relação detalhada dos cursos, mini-cursos e oficinas consta no programa 6.

Fórmula de cálculo:

[Número de pesquisadores externos treinados]

18 – Horas de treinamento por funcionário

Previsto: 20 horas por funcionário

Realizado: 26 horas por funcionário

Durante o ano de 2004 foram realizadas 6.630 horas de treinamento para uma força de trabalho de 252 pessoas.

Fórmula de cálculo:

[Total de horas de treinamento/número de funcionários]

19 – Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão

Previsto: 30% de alavancagem

Realizado: 60% de alavancagem

Os recursos do Contrato de Gestão recebidos em 2004 totalizaram R\$ 22,5 milhões, sendo que R\$ 1,9 milhão como restos a pagar referentes ao orçamento de 2003, ficando R\$ 885 mil, do orçamento 2004 como restos a pagar para 2005. Os recursos de agência de fomento, receitas de aplicações financeiras, vendas e outras fontes, foram de R\$ 14,028 milhões. A alavancagem foi de 60%.

Fórmula de cálculo:

[recursos de outras fontes/recursos do contrato de gestão]

CONCLUSÃO

Em 2004 o LNLS intensificou o seu papel, em nível nacional, como articulador e executor de ações científicas para o Ministério de Ciência e Tecnologia em suas áreas afins. Em particular, além de sua missão primeira, de atuar como um laboratório aberto, multiusuário e multidisciplinar, o laboratório atuou nas áreas de nanociência e nanotecnologia, biologia molecular estrutural e proteômica.

Na área de nanociência e nanotecnologia, além de manter as instalações abertas e os laboratórios de pesquisa, o LNLS intensificou, com sucesso, os esforços para viabilizar a ampliação do Laboratório de Microscopia Eletrônica. Além disso, foram intensificadas as atividades de preparação de novos materiais. Na área de biologia estrutural, a rede nacional de biologia molecular estrutural finalmente começou seus trabalhos de forma regular, possibilitando o treinamento e a realização de pesquisas nesta área em todo o Brasil. Finalmente, o laboratório de espectrometria de massas foi aberto aos usuários e o LNLS assumiu a coordenação de uma parte da rede nacional de proteoma, através do projeto FINEP/FAPESP.

O LNLS manteve seu ritmo de crescimento e de aproveitamento da capacidade instrumental instalada, abrindo uma nova linha de luz para os usuários (XPD) e (praticamente) concluindo uma nova linha (SAXS-2) além de iniciar a construção de outras três linhas de luz (MX2, XAS-2 e VUVF). Melhorias foram realizadas na fonte de luz síncrotron, onde destaca-se a introdução dos novos *kickers* e a cobertura do anel, em fase final de instalação.

Deve-se também destacar o início da instalação do primeiro dispositivo de inserção, um *wiggler* para a produção de luz para a linha de cristalografia de proteínas com técnica MAD. A câmara de vácuo foi instalada e o *wiggler* foi caracterizado e será instalado no início de 2005.

Durante a operação da fonte de luz síncrotron, no primeiro semestre, problemas de estabilidade ocorreram devido a efeitos das novas instalações de RF. Isto forçou uma parada emergencial de três semanas para finalizar o comissionamento da fonte de luz síncrotron, com prejuízo para alguns usuários. O problema foi sanado e parte do tempo foi recuperado no 2º semestre.

Em 2004 foram intensificados os esforços na interação com o setor privado, iniciando-se vários contatos com indústrias que realizam desenvolvimento tecnológico e estabelecendo-se convênios para a realização de projetos de desenvolvimento com algumas delas.

A consolidação destes esforços está representada no atendimento aos usuários, com a realização de 587 propostas de pesquisas nas instalações do LNLS, o que significou mais de 1.000 usuários externos utilizando o laboratório e nas pesquisas realizadas utilizando as instalações, o que resultou em 177 publicações científicas em periódicos indexados em 2004.

Apêndices

Indicadores de Desempenho

Relatório de Gestão 2004

Primeiramente é importante considerar que os indicadores de desempenho pactuados no Contrato de Gestão firmado entre a ABTLuS e o MCT/CNPq devem-se manter aderentes à missão institucional da Associação e aos macroobjetivos:

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 similares no mundo.
3. Implantar e gerir a infra-estrutura da ABTLuS visando ganhos de eficiência e eficácia mediante novos mecanismos de gestão, informação e difusão de Ciência, Tecnologia e Inovação.

O primeiro Macro-Objetivo diz respeito às atividades da ABTLuS enquanto operadora de um centro nacional de pesquisa e desenvolvimento. Este é, portanto, o principal foco das atividades da Associação. O segundo Macro-Objetivo tem a ver com a manutenção de um esforço de pesquisa próprio significativo, capaz de garantir não apenas uma liderança científica para a Associação, mas a qualidade dos serviços prestados para a comunidade externa. Finalmente, o terceiro Macro-Objetivo cobre as atividades de gestão, de informação e de difusão científica e tecnológica da Associação.

Oito programas encontram-se estruturados dentro desses Macro-Objetivos, de acordo com a Tabela a seguir.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

		MO1	MO2	MO3
	Macro-objetivos	Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação	Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo	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
	PROGRAMAS			
1	P,D & I com luz síncrotron	⊙	⊙	○
2	P,D, & I em micro- e nanotecnologias	⊙	⊙	○
3	P,D & I em biologia molecular estrutural e biotecnologia	⊙	⊙	○
4	P,D, & I em aceleradores e instrumentação	⊙	⊙	○
5	Interação com setor industrial	⊙	⊙	⊙
6	Informação, Educação e Divulgação	⊙	⊙	⊙
7	Gestão e Planejamento	⊙	⊙	⊙
8	Manutenção e Melhoramentos	⊙	⊙	⊙

A convenção adotada em relação aos símbolos acima é:

Foco do Programa em relação ao Macro-Objetivo	
Central	⊙
Importante	⊙
Indireto	○

Três dos programas estão diretamente relacionados com as atividades de pesquisa, desenvolvimento e inovação da Associação (P1, P2 e P3). Um quarto programa de P, D & I está voltado para a área de aceleradores de partículas e fontes de radiação eletromagnética (P4). Outros dois programas englobam as atividades de Interação com Setor Industrial (P5) e aquelas de Informação, Educação e Divulgação (P6), inclusive o treinamento de usuários das várias instalações da Associação. Os dois programas restantes dizem respeito às atividades de Gestão e Planejamento (P7), com atenção especial àquelas referentes à implantação, acompanhamento e avaliação do Contrato de Gestão, e de Manutenção e Melhoramentos do campus (P8). As várias atividades da ABTLuS, que definem o centro de custos, passam a ser, a partir de 2001, estruturadas em termos dos Programas acima definidos, permitindo um melhor acompanhamento gerencial do Plano por parte da Diretoria.

Nesse contexto e aderentes aos Macro-Objetivos da ABTLuS a seguir serão detalhados os indicadores de desempenho pactuados no Contrato de Gestão.

Indicadores de Desempenho

1. Número de horas - linha

Finalidade: Medir, em horas, a capacidade máxima de uso das linhas de luz por parte dos usuários dessas instalações. Particularmente relevante no que refere-se a prover infra-estrutura à comunidade científica nacional e internacional com uso multidisciplinar e de modo aberto.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Produto do total de linhas de luz instaladas por horas de feixe destinados aos usuários de luz síncrotron

Fórmula de cálculo: [linhas de luz * total de horas de feixe]

2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron

Finalidade: Destacar a quantidade de horas destinadas exclusivamente para o uso da infra-estrutura das linhas de luz pela comunidade científica. Esse indicador tem particular relevância para o comprometimento da ABTLuS em atender a crescente demanda qualificada de usuários.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Quantidade de horas totais destinadas aos usuários de luz síncrotron

Fórmula de cálculo: [número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron]

3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)

Finalidade: Identificar a capacidade qualitativa do atendimento técnico da fonte de luz síncrotron aos usuários dentro dos prazos e períodos programados nos agendamentos de realização dos experimentos. Para o uso das instalações abertas do LNLS o acompanhamento da confiabilidade da máquina tem importância relevante e tem sido pontuado com peso 3.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Resultado das horas de luz síncrotron entregues aos usuários no tempo programado dividido pelas horas previstas no cronograma anual.

Fórmula de cálculo: [horas entregues no tempo programado/horas previstas]

4. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron

Finalidade: 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.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: 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 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 de cálculo: $\{[(\text{Corrente Inicial Média}/\text{Corrente Inicial Média Nominal})^*3] + [(\text{Tempo de Vida Médio}/\text{Tempo de Vida Médio Nominal})^*1] + [(\text{Corrente Média}/\text{Corrente Média Nominal})^*5]\} / (3+1+5)$

5. Horas de estudo de máquinas e comissionamento

Finalidade: Indicativo da necessidade de investimento em estudo de máquina para a manutenção da competitividade internacional da fonte de luz síncrotron brasileira. Possui capacidade relativa de estabelecer parâmetros de comparação internacional.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Total de horas dedicadas para estudos de máquina e comissionamento de componentes ou instalações.

Fórmula de cálculo: [Total de horas dedicadas a estudos de máquina e comissionamento]

6. Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron

Finalidade: Identificar a capacidade de ampliação do tempo de operação da fonte de luz síncrotron

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Inclui as horas destinadas a usuários, injeção, estudos da máquina, manutenção e comissionamento por total de horas no ano

Fórmula de cálculo: $1 - \frac{\text{horas de máquina desligada}}{\text{total de horas no ano}}$

7. Custo por proposta realizada nas instalações abertas

Finalidade: Indicador com capacidade de estabelecer padrão de comparação internacional visa identificar os gastos totais por propostas realizadas em um determinado período. Apresenta uma medida de eficiência econômica no uso dos recursos tendo como comparação instituições internacionais similares.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Coeficiente dos gastos totais do período pelo total de propostas de pesquisas realizadas em instalações abertas.

Fórmula de cálculo: [Gastos totais / indicador 8]

8. Número de propostas realizadas

Finalidade: Incorpora a realização de propostas nas instalações abertas do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron e visa medir o uso dessas instalações, ou seja, caracterizar a relação de demanda de uso da infra-estrutura dos laboratórios nacionais.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Contempla as propostas realizadas nas instalações abertas, independente da fonte de financiamento

Fórmula de cálculo: [número de propostas realizadas]

9. Índice de satisfação dos usuários

Finalidade: Medir a satisfação dos usuários das instalações abertas do LNLS de modo sistemático e periódico a partir do relatório anual do "ombduspersion".

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: A partir do questionário elaborado pelo "ombduspersion" e respondido pelos usuários da infra-estrutura do LNLS, foram destacados dois itens principais: qualidade da fonte de luz síncrotron e do apoio técnico, qualidade do apoio administrativo (SAU).

Fórmula de cálculo: {[Dentro do esperado e/ou Além do esperado nos itens Qualidade e Apoio Técnico]*peso]+[Dentro do esperado e/ou Além do esperado no item Qualidade do apoio administrativo)*peso]

10. Número total de publicações

Finalidade: Medir qualitativamente os resultados das pesquisas realizadas com uso das instalações abertas do LNLS. Esse indicador, em particular, tem significativas limitações para comparação internacional e para captação por dependência de informações de diversos agentes, fato que compromete sua aferição.

Aderência ao Macro-Objetivo: Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.

Métrica: Publicações de usuários da infra-estrutura de pesquisa em periódicos indexados pelo Institute For Scientific Information/Thomson Scientific - ISI

Fórmula de cálculo: [Total de publicações em periódicos indexados]

11. Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS

Finalidade: Medir a produção científica da equipe interna do LNLS. 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.

Aderência ao Macro-Objetivo: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo

Métrica: Coeficiente do total de publicações em periódicos indexados de pesquisadores vinculados a ABTLuS por número de pesquisadores da instituição

Fórmula de cálculo: [Publicações de pesquisadores ABTLuS/número de pesquisadores da ABTLuS]

12. Taxa de orientação de pós - graduados

Finalidade: Identificar a capacidade de atratividade técnica e científica do LNLS à temas de pesquisa para alunos de pós-graduação. Esse indicador, de certo modo, proporciona a continuidade do uso das técnicas de pesquisa com uso das instalações abertas do LNLS.

Aderência ao Macro-Objetivo: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo

Métrica: Razão dos pós-graduados orientados por número de pesquisadores vinculados a ABTLuS

Fórmula de cálculo: [Total de pós-graduados orientados/total de pesquisadores ABTLuS]

13. Taxa de supervisão de pós - doutores

Finalidade: Incentivar a expansão das atividades realizar e difundir pesquisa própria com utilização de pós-doutores qualificados.

Aderência ao Macro-Objetivo: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo

Métrica: Razão dos pós-doutores supervisionados por número de pesquisadores vinculados a ABTLuS.

Fórmula de cálculo: [Total de pós-doutores orientados/total de pesquisadores ABTLuS]

14. Número de memorandos técnicos disponíveis na Internet

Finalidade: Os memorando técnicos são instrumentos importantes de divulgação de produção técnica qualificada. Esse indicador visa incentivar e medir a documentação interna e divulgá-la em meio eletrônico.

Aderência ao Macro-Objetivo: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo

Métrica: Número de memorandos técnicos disponíveis no website do LNLS

Fórmula de cálculo: [Total de memorandos técnicos no website do LNLS]

15. Número de projetos de desenvolvimento tecnológico

Finalidade: Os projetos de desenvolvimento tecnológico caracterizam-se por parcerias com outras instituições, públicas ou privadas, para a busca de soluções tecnológicas de relativa complexidade e interesse mútuo. Esse indicador visa estabelecer metas constantes desse tipo de interação que deve sempre ser acompanhado com a perspectiva qualitativa e de resultados de médio e longo prazo.

Aderência ao Macro-Objetivo: 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

Métrica: Total de convênios de desenvolvimento tecnológico firmados e vigentes no período.

Fórmula de cálculo: [Total de projetos realizados]

16. Número de técnicos externos treinados

Finalidade: Incentivar a transferência de conhecimento tecnológico desenvolvido a partir das experiências da equipe do LNLS à comunidade de técnicos das diversas áreas de atuação.

Aderência ao Macro-Objetivo: 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

Métrica: Técnicos da indústria ou de institutos de pesquisa treinados pela ABTLuS no ano, inclusive estagiários.

Fórmula de cálculo: [Número de técnicos treinados]

17. Número de pesquisadores externos treinados

Finalidade: Ampliar a capacidade qualitativa de pesquisadores no uso das instalações ou técnicas de pesquisa oferecidas pelo LNLS com treinamento sistemático e incentivar novos grupos de pesquisadores.

Aderência ao Macro-Objetivo: 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

Métrica: Realização de eventos destinado ao treinamento de pesquisadores de outras instituições, inclusive mini-cursos e palestras.

Fórmula de cálculo: [Número de pesquisadores externos treinados]

18. Horas de treinamento por funcionário

Finalidade: A destinação de recursos para realização de treinamento dos funcionários da ABTLuS tem por objetivo manter a qualidade técnica, científica e administrativa e maximizar a capacidade dos recursos humanos disponíveis.

Aderência ao Macro-Objetivo: 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

Métrica: Coeficiente das horas dedicadas a treinamento dos grupos internos de trabalho, sejam cursos internos ou externos, pelo total de funcionários da instituição.

Fórmula de cálculo: [Total de horas de treinamento/número de funcionários]

19. Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão

Finalidade: Medir a capacidade de alavancagem de recursos por parte da ABTLuS em fontes diferentes do Contrato de Gestão .

Aderência ao Macro-Objetivo: 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.

Métrica: Coeficiente dos recursos totais destinados à operação do LNLS, inclui agências de fomento, rendimentos financeiros, bolsas, aluguel, etc, por recursos do contrato de gestão efetivamente repassados no período, inclusive os restos a pagar de anos anteriores.

Fórmula de cálculo: $[\text{recursos de outras fontes} / \text{recursos do contrato de gestão}]$

**Artigos Publicados em Periódicos Indexados por Pesquisadores da ABTLuS
(os nomes sublinhados são de pesquisadores do quadro próprio da ABTLuS)**

1. *Ki-1/57 interacts with RACK1 and is a substrate for the phosphorylation by phorbol 12-myristate 13-Acetate-activated protein kinase* C. Nery, F. C., Passos, D. O., Garcia, V. S., Kobarg, J. **Journal of Biological Chemistry**, **279**: 11444-55 (2004)
2. *A spectroscopic-based laboratory experiment for protein conformational studies.* Ramos, C. H. I. **Biochemistry and Molecular Biology Education**, **32**: 31-4 (2004)
3. *Expression and purification of a small heat shock protein from the plant pathogen Xylella fastidiosa.* Azzoni, A. R., Tada, S. F. S., Rosselli, L. K., Paula, D. P., Catani, C. F., Sabino, A. A., Barbosa, J. A. R. G., Guimarães, B. G., Eberlin, M. N., Medrano, F. J., Souza, A. P. **Protein Expression & Purification**, **33**: 297-303 (2004)
4. *Origin of the anomalous circular dichroism spectra of many apomyoglobin mutants.* Ribeiro-Júnior, E. A., Ramos, C. H. I. **Analytical Biochemistry**, **329**: 300-6 (2004)
5. *Stability and folding studies of the N-domain of troponin C. Evidence for the formation of an intermediate.* Ramos, C. H. I., Lima Jr., M. V., Silva, S. L. F. da, Borin, P. F. L., Regis, W. C. B., Santoro, M. M. **Archives of Biochemistry and Biophysics**, **427**: 135-42 (2004)
6. *New protein-protein interactions identified for the regulatory and structural components and substrates of the type III secretion system of the phytopathogen Xanthomonas axonopodis Pathovar citri.* Alegria, M. C., Docena, C., Khater, L., Ramos, C. H. I., Silva, A. C. R. da, Farah, C. S. **Journal of Bacteriology**, **186**: 6186-97 (2004)
7. *Effects of cardiomyopathic mutations on the biochemical and biophysical properties of the human alpha-tropomyosin.* Hilario, E., Silva, S. L. F. da, Ramos, C. H. I., Bertolini, M. C. **European Journal Biochemistry**, **271**: 4132-40 (2004)
8. *Modeling the Trypanosoma cruzi Tc85-11 protein and mapping the laminin-binding site .* Marroquin-Quelopana, M., Oyama, S.T., Pertinhez, T. A., Spisni, A., Juliano, M. A., Juliano, L., Colli, W., Alves, M. J. M. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, **325**: 612-8 (2004)
9. *Amyloidogenicity and cytotoxicity of recombinant mature human islet amyloid polypeptide (rhlAPP).* Lopes, D. H. J., Colin, C., Degaki, T. L., Sousa, A. C. V. de, Vieira, M. N. N., Sebollela, A., Blanco Martinez, A. M., Bloch Jr., C., Ferreira, S. T., Sogayar, M. C. **Journal of Biological Chemistry** **279**: 42803-810 (2004)
10. *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of an oxidized state of Ohr from Xylella fastidiosa* Oliveira, M. A., Soares Netto, L. E., Medrano, F. J., Barbosa, J. A. R. G., Alves, S. V., Cussiol, J. R. R., Guimarães, B. G. **Acta Crystallographica D**, **60**: 337-9 (2004)
11. *Expression, crystallization and preliminary X-ray analysis of the Pyrococcus abyssi protein homologue of saccharomyces cerevisiae Nip7p.* Coltri, P. P., Guimarães, B. G., Oliveira, C. C., Zanchin, N. I. T. **Acta Crystallographica D**, **60**: 1925-8 (2004)
12. *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of HeLp, a heme lipoprotein from the hemolymph of the cattle tick Boophilus microplus.* Alves, L. R., Oliveira, P. L.,

- Barbosa, J. A. R. G., Guimarães, B. G., Javier Medrano, F. **Acta Crystallographica D**, **60: 1639-40 (2004)**
13. *Crystallization, data collection and phasing of infestin 4, a factor Xlla inhibitor.* Guimarães, B. G., Campos, I. T. N., Medrano, F. J., Tanaka, A. S., Barbosa, J. A. R. G. **Acta Crystallographica D**, **60: 2051-3 (2004)**
14. *Structural effects on Au and Ag colloidal nanoparticles.* Leite, M. S., Rodrigues, V., Zanchet, D. **Progress in Colloid and Polymer Science**, **128: 131-4 (2004)**
15. *Two new sealed sample cells for small angle X-ray scattering from macromolecules in solution and complex fluids using synchrotron radiation.* Cavalcanti, L. P., Torriani, I., Plivelic, T. S., Oliveira, C. L. P., Kellermann, G., Neuenschwander, R. T. **Review of Scientific Instruments**, **75: 4541-6 (2004)**
16. *Phonon activity and intermediate glassy phase of YVO₃.* Massa, N. E., Piamonteze, C., Tolentino, H. C. N., Alonso, J. A., Martinez- Lopes, M.J., Casais, M.T. **Physical Review B**, **69: 054111-1-7 (2004)**
17. *Local effects in strained manganite thin films.* Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Favre-Nicolind, E., Rannod, L. **Journal of Alloys and Compounds**, **369: 205-8 (2004).**
18. *Long-range vs. short-range ordering in synthetic Cr-substituted goethites.* Sileo, E. E., Ramos, A. Y., Magaz, G. E., Blesa, M. A. **Geochimica et Cosmochimica Acta**, **68: 3053-63 (2004)**
19. *Local tetragonal distortion in La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ strained thin films probed by X-ray absorption.* Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Favre-Nicolind, E., Ranno, L. **Physical Review B**, **70: 174451-1-8 (2004)**
20. *Local atomic and electronic structure in LaMnO₃ across the orbital ordering transition.* Souza, R. A. de, Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Granado, E. **Physical Review B**, **70: 214426-1-6 (2004)**
21. *EXAFS characterisation of Ge nanocrystals in silica.* Ridgway, M. C., Azevedo, G. de M., Glover, C. J., Elliman, R. G., Llewellyn, D. J., Cheung, A., Johannessen, B., Brett, D. A., Foran, G. J. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, **218: 421-6 (2004)**
22. *Relativistic and interchannel coupling effects in photoionization angular distributions by synchrotron spectroscopy of laser cooled atoms.* Coutinho, L. H., Cavasso-Filho, R. L., Rocha, T. C. R., Homem, M. G. P., Figueira, D. S. L., Fonseca, P. T., Cruz, F. C., Brito, A. N. de. **Physical Review Letters**, **93: 183001-1-4 (2004)**
23. *Aniline polymerization into Montmorillonite clay: a spectroscopic investigation of the intercalated conducting polymer.* Nascimento, G. M. do, Constantino, V. R. L., Landers, R., Temperini, M. L. A. **Macromolecules**, **37: 9373-85 (2004)**
24. *Pd growth on Cu(111): stress relaxation through surface alloying?* Paniago, R.M., Siervo, A. de, Soares, E. A., Pfannes, H.-D., Landers, R. **Surface Science**, **560: 27-34 (2004)**
25. *Magnetic structure and fluctuations of Gd₂IrIn₈: a resonant X-ray diffraction study.* Granado, E., Pagliuso, P. G., Giles, C., Lora-Serrano, R., Yokaichiya, F., Sarrao, J. L. **Physical Review B**, **69: 144411-1-5 (2004)**

26. *Apparent split between magnetic and structural phase transitions in epitaxial MnAs films.* Iikawa, F., Knobel, M., Santos, P. V., Adriano, C., Couto, O. D. D., Brasil, M. J. S. P., Giles, C., Paniago, R.M. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **272-276: 1154-6 (2004)**
27. *Three-dimensional mapping of the strain anisotropy in self-assembled quantum-wires by grazing incidence X-ray diffraction.* Gutiérrez, H. R., Paniago, R.M., Bortoleto, J. R. R., Cotta, M. A. **Applied Physics Letters**, **85: 3581-3 (2004)**
28. *X-ray study of strain and composition of Si/Ge_{0.85}Si_{0.15} (111) islands grown in Volmer-Weber mode.* Malachias, A., Paniago, R.M., Kycia, S. W., Cahill, D. G. **Journal of Applied Physics**, **96: 3234-8 (2004)**
29. *Small angle X-ray scattering from lipid-bound myelin basic protein in solution.* Haas, H., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Polverini, E., Fasano, A., Carlone, G., Cavatorta, P., Riccio, P. **Biophysical Journal**, **86: 455-60 (2004)**
30. *Structural and magnetic properties of NiFe₂₀₄-SnO₂ nanocomposites.* Albuquerque, A. S., Ardisson, J. D., Macedo, W. A. A., Plivelic, T. S., Torriani, I., Larrea, J., Saitovitch, E. B. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **272-276: 2211-3 (2004)**
31. *Calorimetric and structural investigation of the interaction of lysozyme and bovine serum albumin with poly(ethylene oxide) and its.* Almeida, N. L., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Loh. **Colloids and Surfaces B - Biointerfaces**, **38: 67-76 (2004)**
32. *Estudo da degradação "in vitro" de blendas de poli(beta-hidroxibutirato) (PHB) / poli(L-ácido lático) (PLLA) na forma de filmes.* Vanin, M., Santana, C. C., Torriani, I., Plivelic, T. S., Duek, E. A. R. **Polímeros: Ciência e Tecnologia**, **14: 187-93 (2004)**
33. *X-ray scattering from self-assembled InAs Island.* Malachias, A., Neves, B. R. A., Rodrigues, W. N., Moreira, M. V. B., Kycia, S. W., Metzger, T.H., Paniago, R.M. **Brazilian Journal of Physics**, **34: 571-6 (2004)**
34. *Structural effects on Au and Ag colloid nanoparticles.* Leite, M. S., Rodrigues, V., Zanchet, D. **Progress in Colloid and Polymer Science**, **128: 131-4 (2004)**
35. *Investigating strongly correlated electron systems with synchrotron X-ray diffraction at LNLS.* Granado, E. **Physica B - Condensed Matter**, **351: 320-5 (2004)**
36. *Carbon nanotube probe resolution: a quantitative analysis using fourier transform.* Gutiérrez, H. R., Nakabayashi, D., Silva, P. C., Bortoleto, J. R. R., Rodrigues, V., Clerici, J. A. H., Cotta, M. A., Ugarte, D. **Physica Status Solidi A**, **(2004)**
37. *Application of discrete distribution point heat source model to simulate multipass weld thermal cycles in medium thick plates.* Ramirez, A. J., Brandi, S. D. **Science and Technology of Welding and Joining**, **9: 72-82 (2004)**
38. *High temperature behavior of Ni-base weld metal. Part I. Ductility and microstructural characterization.* Ramirez, A. J., Lippold, J. C. **Materials Science and Engineering A - Structural Materials**, **380: 259-71 (2004)**
39. *Indication of unusual pentagonal structures in atomic-size Cu nanowires.* Gonzalez, J. C., Rodrigues, V., Bettini, J., Rocha, A. R., Rego, L. G. C., Coura, P. Z., Dantas, S. O., Sato, F., Galvao, D. S., Ugarte, D. **Physical Review Letters**, **93: 126103-1-4 (2004)**

40. *Contaminants in suspended gold chains: an Ab initio molecular dynamics study.* Legoas, S. B., Rodrigues, V., Ugarte, D., Galvao, D. S. **Physical Review Letters**, **93**: 216103-1-4 (2004)
41. *On the structural and stability features of linear atomic suspended chains formed from gold nanowires stretching.* Coura, P. Z., Legoas, S. B., Moreira, A. S., Sato, F., Rodrigues, V., Dantas, S. O., Ugarte, D., Galvao, D. S. **Nano Letters**, **4**: 1187-91 (2004)
42. *Synthesis and characterization of silver nanoparticle/polyaniline nanocomposites.* Oliveira, M. M., Zanchet, D., Ugarte, D., Zarbin, A. J. G. **Progress in Colloid and Polymer Science**, **128**: 126-8 (2004)
43. *Secondary austenite and chromium nitride precipitation in simulated heat affected zones of duplex stainless steels.* Ramirez, A. J., Brandi, S. D., Lippold, J. C. **Science and Technology of Welding and Joining**, **9**: 301-13 (2004)
44. *Surface modification with phosphoric acid of SiO₂/Nb₂O₅ prepared by the sol-gel method: structural-textural and acid sites studies and an ion exchange model.* Francisco, M. S. P., Cardoso, W. S., Gushikem, Y., Landers, R., Kholin, Y. V. **Langmuir**, **20**: 8707-14 (2004)
45. *An investigation of ductility-dip cracking in nickel-based weld metals.* Collins, M. G., Ramirez, A. J., Lippold, J. **Welding Journal**, **83**: 39s-49s (2004)
46. *Quantitative analysis of gold nanoparticles from synchrotron data by means of least-squares techniques: least-squares analysis of gold nanoparticles.* Cervellino, A., Giannini, C., Guagliardi, A., Zanchet, D. **European Physical Journal B**, **41**: 485-93 (2004)
47. *Annealing of phosphorous-doped Ge islands on Si(001).* Kamins, T. I., Medeiros-Ribeiro, G., Ohlberg, D. A. A., Williams, R. S. **Journal of Applied Physics**, **95**: 1562-7 (2004)
48. *Aharonov-Bohm signature for neutral polarized excitons in type-II quantum dots ensemble.* Ribeiro, E., Govorov, A. O., Carvalho Jr., W., Medeiros-Ribeiro, G. **Physical Review Letters**, **92**: 126402-1-4 (2004)
49. *Optical properties of type-I and II quantum dots.* Iikawa, F., Godoy, M. P. F., Nakaema, M. K. K., Brasil, M. J. S. P., Maialle, M. Z., Degani, M. A., Ribeiro, E., Medeiros-Ribeiro, G., Carvalho Jr., W., Brum, J. A. **Brazilian Journal of Physics**, **34**: 555-9 (2004)
50. *Elastic energy mapping of epitaxial nanocrystals.* Medeiros-Ribeiro, G., Malachias, A., Kycia, S. W., Paniago, R.M., Williams, R. S. **Applied Physics A - Materials**, (2004)
51. *Core-level photoemission study of the InAs/CdSe nanocrystalline system.* McGinley, C., Borchert, H., Talapin, D. V., Adam, S., Lobo, A., Castro, A. R. B., Haase, M., Weller, H., Moller, T. **Physical Review B**, **69**: 045301-1-6 (2004)
52. *Generalization of the duration-time concept for interpreting high-resolution resonant photoemission spectra.* Gel'Mukhanov, F. K., Agren, H., Piancastelli, M. N., Andersson, M., Öhrwall, G., Miron, C., Sorensen, S. L., Brito, A. N. de, Björneholm, O., Karlsson, L., Svensson, S. **Physical Review A**, **69**: 022707-1-12 (2004)
53. *The size of neutral free clusters as manifested in the relative bulk-to surface intensity in core level photoelectron spectroscopy.* Tchapyguine, M., Marinho, R. R., Gisselbrecht, M., Schulz, J., Sorensen, S. L., Martensson, N., Brito, A. N. de, Feifel, R., Öhrwall, G.,

- Lundwall, M., Svensson, S., Björneholm, O. **Journal of Chemical Physics**, **120**: 345-56 (2004)
54. *Interaction of argon clusters with intense VUV-laser radiation: the role of electronic structure in the energy-deposition process.* Laarmann, T., Castro, A. R. B., Gurtler, P., Laasch, W., Schulz, J., Wabnitz, A., Möller, T. **Physical Review Letters**, **92**: 143401-1-4 (2004)
55. *Interactions at the dimer interface influence the relative efficiencies for purine nucleotide synthesis and pyrophosphorolysis in a phosphoribosyltransferase.* Canyuk, B., Medrano, F. J., Wenck, M. A., Focia, P. J., Eakin, A. E., Craig III, S. P. **Journal of Molecular Biology**, **335**: 905-21 (2004)
56. *Saturation mutagenesis, complement selection, and steady-state kinetic studies illuminate the roles of invariant residues in active site loop I of the hypoxanthine phosphoribosyltransferase from Trypanosoma cruzi.* Butterworth, A. C., Medrano, F. J., Eakin, A. E., Craig III, S. P. **Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics**, **1699**: 87-94 (2004)
57. *Magnetic inhomogeneities in electron-doped Ca_{1-x}La_xMnO₃.* Ling, C. D., Granado, E., Neumeier, J. J., Lynn, J. W., Argyrion, D. N. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **272-276**: 246-8 (2004)
58. *Steady-state kinetics of the hypoxanthine phosphoribosyltransferase from Trypanosoma cruzi.* Wenck, M. A., Medrano, F. J., Eakin, A. E., Craig, S. P. **Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics**, **1700**:11-8 (2004)
59. *Magneto-optics from type-II single quantum dots.* Godoy, M. P. F., Nakaema, M. K. K., Iikawa, F., Brasil, M. J. S. P., Bortoleto, J. R. R., Cotta, M. A., Ribeiro, E., Medeiros-Ribeiro, G. **Physica Status Solidi C**, **1**: 543-6 (2004)
60. *Valence band anti-crossing in GaAs/AlGaAs quantum wells under tensile biaxial strain.* Gomes, P. F., Godoy, M. P. F., Nakaema, M. K. K., Iikawa, F., Lamas, T. E., Quivy, A. A., Brum, J. A. **Physica Status Solidi C**, **1**: 547-50 (2004)
61. *Expression, purification and characterization of a novel bZIP protein from sugarcane.* Schlögl, P. S., Kobarg, J., Moreau, V. H., Leite, A., Sabino, A. A., Eberlin, M. N., Menossi, M. **Plant Science**, **167**: 583-95 (2004)
62. *From localised to delocalised electronic states in free Ar, Kr and Xe clusters.* Feifel, R., Tchapyguine, M., Öhrwall, G., Lundwall, M., Marinho, R. R. T., Gisselbrecht, M., Sorensen, S. L., Brito, A. N. de, Karlsson, L., Martensson, N., Svensson, S., Björneholm, O. **European Physical Journal D**, **30**: 343-51 (2004)
63. *Detection and possible prognostic relevance of p53 gene mutations in diffuse large B-cell lymphoma. An analysis of 51 cases and review of the literature.* Kerbauy, F. R., Colleoni, G. W. B., Saad, S. T. O., Silva, M. R. R., Alves, A. C., Aguiar, K. C. C., Albuquerque, D. M., Kobarg, J., Seixas, M. T., Kerbauy, J. **Leukemia & Lymphoma**, **45**: 2071-8 (2004)
64. *Environmental detection of mouse allergen by means of immunoassay for recombinant Mus m 1.* Ferrari, E., Tsay, A., Eggleston, P. A., Spisni, A., Chapman, M. D. **Journal of Allergy and Clinical Immunology**, **114**: 341-6 (2004)
65. *Crystal structures and magnetic order of La_{0.5+delta}Mn_{0.5+epsilon}Ru_{0.5-epsilon}O₃ (A=Ca,Sr,Ba): possible orbital glass ferromagnetic state.* Granado, E., Huang, Q., Lynn, J. W., Gopalakrishnan, J., Ramesha, K. **Physical Review B**, **70**: 214416-1-7 (2004)

66. *The NMR-derived solution structure of a new cationic antimicrobial peptide from the skin secretion of the anuran *Hyla punctata**. Prates, M. V., Sforça, M. L., Regis, W. C. B., Leite, J. R. S. A., Silva, L. P., Pertinhez, T. A., Araújo, A. L. T., Azevedo, R. B., Spisni, A., Bloch Jr., C. **Journal of Biological Chemistry**, **279**: 13018-26 (2004)
67. *How C-terminal carboxyamidation alters the biological activity of peptides from the venom of the eumenine solitary wasp*. Sforça, M. L., Oyama, S.T., Canduri, F., Lorenzi, C. C. B., Pertinhez, T. A., Konno, K., Souza, B. M., Palma, M.S., Ruggiero Neto, J., Azevedo Jr., W. F. de, Spisni, A. **Biochemistry**, **43**: 5608-17 (2004)
68. *Letter to the editor: 1H, 15N and 13C resonance assignments of the ApaG protein of the phytopathogen *Xanthomonas axonopodis* pv.citri*. Katsuyama, M., Cicero, D. O., Spisni, A., Paci, M., Farah, C. S., Pertinhez, T. A. **Journal of Biomolecular NMR**, **29**: 423-4 (2004)
69. *Anisotropy of the Raman spectra of nanographite ribbons*. Cançado, L. G., Pimenta, M. A., Neves, B. R. A., Medeiros-Ribeiro, G., Enoki, T., Kobayashi, Y., Takai, K., Fukui, K.-I., Dresselhaus, M. S., Saito, R., Jorio, A. **Physical Review Letters**, **93**: 047403-1-4 (2004)
70. Ionic dissociation of glycine, alanine, valine and proline as induced by VUV (21.21 eV) photons. Lago, A. F., Coutinho, L. H., Marinho, R. R. T., Brito, A. N. de, Souza, G. G. B. de. **Chemical Physics**, **307**: 9-14 (2004)
71. Three-dimensional structure of an unusual Kunitz (STI) type trypsin inhibitor from *Capaifera langsdorffii*. Krauchenko, S., Nagem, R. A. P., Silva, J. A., Marangoni, S., Polikarpov, I. **Biochimie**, **86**: 167-72 (2004)
72. Crystal structure alpha-galactosidase from *Trichoderma reesei* and its complex with galactose: implications for catalytic mechanism. Golubev, A. M., Nagem, R. A. P., Neustroev, K. N., Brandão Neto, J. R., Eneiskaya, E. V., Kulminkaya, A. A., Savelév, A. N., Shabalin, K. A., Polikarpov, I. **Journal of Molecular Biology**, **339**: 413-22 (2004)
73. Structural study of the Ag (110) c (2x2) –Sb phase by low energy electron diffraction. Paniago, R.M., Siervo, ^a de, Castilho, C.M.C. de, Landers, R., Soares, E.^a, Carvalho, V.E. de **Surface Science**, **572**:337-46 (2004)
74. Crystallization of a non-B and a B mutant HIV protease. Sanches, M., Martins, N.H., Calazans, A., Brindeiro, R. de M., Tanuri, A, Antunes, O A. C., Polikarpov, I. **Acta Crystallographica D**, **60**: 1625-7 (2004).
75. Crystal structure of exo-inulinase from *Aspergillus awamori*: the enzyme fold and structural determinants of substrate recognition. Nagem, R.A.P., Golubev, A.M., Korneeva, O.S., Eneiskaya, E. V., Kulminkaya, A.A., Neustroev, K.N., Polikarpov, I. **Jornal of Molecular Biology**, **344**: 471-80 (2004)
76. Crystal structures of Beta-galactosidase from *Penicillium* sp. and its complex with galactose. Rojas, A.L., Nagem, R.A. P., Neustroev, K.N., Arand, M., Adamska, M., Eneiskaya, E.V., Kulminkaya, A. A. , Garratt, R.C., Golubev, A.M., Polikarpov I. **Jornal of Molecular Biology**, **343**: 1281-92 (2004)
77. High temperature behavior of Ni-base weld metal. Part II – Insight into the mechanism for ductility dip cracking. Ramirez, A.J., Lippold, J.C. **Materials Science and Engineering A- Structural Materials**, **380**: 245-58 (2004)

Artigos Publicados em Periódicos Indexados por Colaboradores e Pesquisadores Externos

1. Expression and purification of a putative H-NS nucleoid-associated protein from the phytopathogen *Xylella fastidiosa*. Paula, D. P., Azzoni, A. R., Tada, S. F. S., Catani, C. F., Rosselli, L. K., Souza, A. P. **Protein Expression & Purification**, **32**: 61-7 (2004)
2. High order quaternary arrangement confers increased structural stability to *Brucella* sp. lumazine synthase. Zylberman, V., Craig, P. O., Klinke, S., Braden, B. C., Cauerhff, A., Goldbaum, F. A. **Journal of Biological Chemistry**, **279**: 8093-8101 (2004)
3. Ca²⁺-induced rolling of tropomyosin in muscle thin filaments. The alpha and beta-band hypothesis revised. Holthauzen, L. M. F., Corrêa, F., Farah, C. S. **Journal of Biological Chemistry**, **279**: 15204-13 (2004)
4. Structures of human purine nucleoside phosphorylase complexed with inosine and ddI. Canduri, F., Santos, D. M. dos, Silva, R. G., Mendes, M. A., Basso, L. A., Palma, M.S., Azevedo Jr., W. F. de, Santos, D. S. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, **313**: 907-14 (2004)
5. Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of the lectin from *canavalia gladiata* seeds. Moreno, F. B. M. B., Delatorre, P., Freitas, B. T., Rocha, B. A. M., Souza, E. P., Facó, F., Canduri, F., Cardoso, A. L. H., Freire, V. N., Lima Filho, J. L., Sampaio, A. H., Calvete, J. ., Cavada, B. S., Azevedo Jr., W. F. de. **Acta Crystallographica D**, **60**: 1493-5 (2004)
6. Crystal structure of an acidic platelet aggregation inhibitor and hypotensive phospholipase A2 in the monomeric and dimeric states: insights into its oligomeric state. Magro, A. J., Murakami, R. K., Soares, A. M., Arni, R. K., Fontes, M. R. M. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, **323**: 24-31 (2004)
7. Crystallization and preliminary crystallographic analysis of SMase I, a sphingomyelinase from *Loxosceles laeta* spider venom. Zela, S. P., Fernandes Pedrosa, M. F., Murakami, M. T., Andrade, S. A. de, Arni, R. K., Tambourgi, D. V. **Acta Crystallographica D**, **60**: 1112-4 (2004)
8. Crystallization and preliminary X-ray crystallographic analysis of chorismate synthase from *Mycobacterium tuberculosis*. Dias, M. V. B., Ely, F., Canduri, F., Pereira, J. H., Frazzon, J., Basso, L. A., Palma, M.S., Azevedo Jr., W. F. de, Santos, D. S. **Acta Crystallographica D**, **60**: 2003-5 (2004)
9. Crystallographic structure of PNP from *Mycobacterium tuberculosis* at 1.9 Å resolution. Nolasco, D. O., Canduri, F., Pereira, J. H., Cortinó, J. R., Palma, M.S., Oliveira, J. S. de, Basso, L. A., Azevedo Jr., W. F. de, Santos, D. S. **Biochemical and Biophysical Research Communications**, **324**: 789-94 (2004)
10. Evidence of clusters size-dependent photoluminescence on silicon-rich silicon oxynitride films. Pereyra, I., Fantini, M. C. A., Alayo, M. I., Scopel, W. L. **Materials Science and Engineering B-Solid State and Adv Tech**, **112**: 116-9 (2004)
11. Structural analysis of silicon oxynitride films deposited by PECVD. Criado, D., Alayo, M. I., Pereyra, I., Fantini, M. C. A. **Materials Science and Engineering B-Solid State and Adv Tech**, **112**: 123-7 (2004)

12. Characterization of electrochemically Co-deposited metal-molybdenum oxide films. Pereira, A. C., Ferreira, T. L., Kosminsky, L., Matos, R. C., Bertotti, M., Tabacniks, M. H., Fantini, M. C. A., Kiyohara, P. K. **Chemistry of Materials**, **16**: 2662-8 (2004)
13. Photon stimulated ion desorption from poly(3-methylthiophene) following sulphur K-shell excitation. Rocco, M. L. M., Weibel, D. E., Roman, L. S., Micaroni, L. **Surface Science**, **560**: 45-52 (2004)
14. Electronic, structural, and magnetic properties of cobalt aggregates embedded in polypyrrole. Watanabe, N., Morais, J. de, Accione, S. B. B., Morrone, A., Schmidt, J. E., Alves, M. C. M. **Journal of Physical Chemistry B**, **108**: 4013-17 (2004)
15. Extended X-ray absorption fine structure, X-ray diffraction and reverse MOnTe Carlo studies of an amorphous Ga₅₀Se₅₀ alloy produced by mechanical alloying. Machado, K. D., Jóvári, P., Lima, J. C., Campos, C. E. M., Grandi, T. A. **Journal of Physics Condensed Matter**, **16**: 581-90 (2003)
16. EXAFS investigation of local structure of Er³⁺ and Yb³⁺ in low-silica calcium aluminate glasses. Sampaio, J. A., Gama, S. **Physical Review B**, **69**: 104203-1-7 (2004)
17. Glass structure and ion dynamics of lead-cadmium fluorgermanate glasses. Tambelli, C. C., Donoso, J. P., Magon, C. J., Bueno, L. A., Messaddeq, Y., Ribeiro, S. J. L., Kosacki, I. **Journal of Chemical Physics**, **120**: 9638-47 (2004)
18. Phase evolution of lead titanate from its amorphous precursor synthesized by the OPM wet-chemical route. Camargo, E. R., Longo, E., Leite, E. R., Mastelaro, V. R. **Journal of Solid State Chemistry**, **177**: 1994-2001 (2004)
19. Cation occupancy sites in synthetic Co-doped magnetites as determined with X-ray absorption (XAS) and Mössbauer spectroscopies. Lelis, M. F. F., Porto, A. O., Gonçalves, C. M., Fabris, J. D. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **278**: 263-9 (2004)
20. Structural modifications in Fe_xCo_{1-x}/Cu multilayers induced by ion irradiation. Graff, I. L., Teixeira, S. R., Amaral, L., Alves, M. C. M., Flores, W. H. **Journal of Applied Physics**, **96**: 1469-74 (2004)
21. Comparison among the local atomic order of amorphous TM-Ti alloys (TM = Co, Ni, Cu) produced by mechanical alloying studied by EXAFS. Machado, K. D., Lima, J. C., Campos, C. E. M., Grandi, T. A. **European Physical Journal B**, **37**: 421-4 (2004)
22. Extended X-ray absorption fine structure, X-ray diffraction and reverse Monte Carlo studies of an amorphous Ga₅₀Se₅₀ alloy produced by mechanical alloying. Machado, K. D., Jóvári, P., Lima, J. C., Campos, C. E. M., Grandi, T. A. **Journal of Physics - Condensed Matter**, **16**: 581-90 (2004)
23. Fe-containing ZSM-11 zeolites as active catalyst for SCR of NO_x. Part II. XAFS characterization and its relationship with the catalytic properties. Requejo, F. G., Ramallo-López, J. M., Beltramone, A. R., Pierella, L. B., Anunziata, O. A. **Applied Catalysis A - General**, **266**: 147-53 (2004)
24. Platinum alloying effects on the behavior of a metal hydride electrode. Ambrósio, R. C., Ticianelli, E. A. **Journal of Solid State Electrochemistry**, **8**: 532-7 (2004)
25. Oxygen electrocatalysis on ultra-thin porous coating rotating ring/disk platinum and platinum-cobalt electrodes in alkaline media. Lima, F. H. B., Ticianelli, E. **Electrochimica Acta**, **49**: 4091-9 (2004)

26. XAS and XRD structural characterization of Lanthanum-modified PbTiO₃ ceramic materials Neves, P. P., Doriguetto, A. C., Mastelaro, V. R., Lopes, L. P., Mascarenhas, Y. P., Michalowicz, A., Eiras, J. A. **Journal of Physical Chemistry B**, **108**: 14840-9 (2004)
27. Rare earth doped silicon nanocrystals derived from an erbium amidinate precursor. Ji, J., Senter, R. A., Tessler, L. R., Back, D., Winter, C. H. **Nanotechnology**, **15**: 643-7 (2004)
28. Change of the electrical properties in Fe-Al₂O₃ granular films. Boff, M. A. S., Teixeira, S. R., Schmidt, J. E., Antunes, A. **Applied Physics Letters**, **85**: 757-8 (2004)
29. Mass spectrometry study of the fragmentation of valence and core-shell (Cl 2p) excited CHCl₃ and CCl₄ molecules. Lago, A. F., Santos, A. C. F., Souza, G. G. B. **Journal of Chemical Physics**, **120**: 9547-55 (2004)
30. Site-specific fragmentation in poly(vinyl chloride) (PVC) photoexcited around the Cl 2p edge. Rocco, M. L. M., Faraudo, G. S., Pontes, F. C., Pinho, R. R., Ferreira, M., Souza, G. G. B. de. **Chemical Physics Letters**, **393**: 213-6 (2004)
31. Study of the ionic fragmentation of shallow- and core-excited fluorocarbonylsulfonyl chloride, FC(O)SCl: observation of a new three-body dissociation mechanism. Erben, M. F., Romano, R. M., Della Védova, C. O. **Journal of Physical Chemistry A**, **108**: 3938-46 (2004)
32. Ionic desorption in valence- and core-excited poly(vinyl chloride). Rocco, M. L. M., Faraudo, G. S., Pinho, R. R., Ferreira, M., Pontes, F. C., Souza, G. G. B. de. **Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena**, **141**: 1-4 (2004)
33. Refinement of monoclinic ReO₂ structure from XRD by Rietveld method. Corrêa, H. P. S., Cavalcante, I. P., Martinez, L. G., Orlando, C. G. P., Orlando, M. T. D. **Brazilian Journal of Physics**, **34**: 1208-10 (2004).
34. L-shell radiative transition rates by selective synchrotron ionization. Bonetto, R., Carreras, A., Tricavelli, J., Castellano, **Journal of Physics B - Atomic Molecular and Optical Physics**, **37**: 1477-88 (2004)
35. Determination of trace elements in *Alternanthera brasiliana* and *Pfaffia glabrata* by SRTXRF: application in environmental pollution control. Salvador, M. J., Moreira, S., Dias, D. A., Zucchi, O. L. A. D. **Instrumentation Science & Technology**, **32**: 321-33 (2004)
36. Resolution and sensitivity for an alternative X-ray fluorescence methods: SEICXRF. Figueroa, R., Garcia, M. **Radiation Physics and Chemistry**, **71**: 701-3 (2004)
37. Evaluation of heavy metals levels in the Paraíba do Sul River by SRTXRF in muscle, gonads and gills of *Geophagus brasiliensis*. Calza, C., Anjos, M. J. dos, Castro, C. R. F., Barroso, R. C., Araújo, F. G., Lopes, R. T. **Radiation Physics and Chemistry**, **71**: 787-8 (2004)
38. Observation of multipolar scattering in holmium with non-resonant X-ray scattering at the LNLS. Yokaichiya, F., Giles, C. **Physica B - Condensed Matter**, **345**: 82-5 (2004)
39. IonRock: software for solving strain gradients of ion-implanted semiconductors by X-ray diffraction measurements and evolutionary programming. Bleicher, L., Sasaki, J. M., Orloski, R. V., Cardoso, L. P., Hayashi, M. A., Swart, J. W. **Computer Physics Communications**, **160**: 158-65 (2004)
40. Fe-containing ZSM-11 zeolites as active catalyst for SCR of NO_x. Part I Synthesis, characterization by XRD, BET and FTIR and catalytic properties. Anunziata, O. A., Beltramone, A. R., Juric, Z., Pierella, L. B., Requejo, F. G. **Applied Catalysis A - General**, **264**: 93-101 (2004)

41. Coherent scattering characteristics of normal and pathological breast human tissues Castro, C. R. F., Barroso, R. C., Anjos, M. J. dos, Lopes, R. T., Braz, D. **Radiation Physics and Chemistry, 71: 649-51 (2004)**
42. Negative thermal expansion in hydrated HZSM-5 orthorhombic zeolite Marinkovic, B. A., Jardim, P. M., Saavedra, A., Lau, L. Y., Baehtz, C., Avillez, R. R. de, Rizzo, F. **Microporous and Mesoporous Materials, 71: 117-24 (2004)**
43. A comparison between thermal expansion properties of hydrated and dehydrated orthorhombic HZSM-5 zeolite Jardim, P. M., Marinkovic, B. A., Saavedra, A., Lau, L. Y., Baehtz, C., Rizzo, F. **Microporous and Mesoporous Materials, 76: 23-8 (2004)**
44. Effect of MnAs/GaAs(001) film accommodations on the phase-transition temperature. Iikawa, F., Brasil, M. J. S. P., Couto, O. D. D., Adriano, C., Giles, C., Däweritz, L. **Applied Physics Letters, 85: 2250-2 (2004)**
45. Comparative study using small-angle X-ray scattering and nitrogen adsorption in the characterization of silica xerogels and aerogels. Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz. **Physical Review B, 69: 064202-1-6 (2004)**
46. Small-angle X-ray scattering study of the structural evolution of the drying of xerogels with the liquid phase exchanged by acetone. Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Maceti. **Physical Review B, 69: 094203-1-5 (2004)**
47. Conformation of the Z19 prolamin by FTIR, NMR, and SAXS. Forato, L. A., Doriguetto, A. C., Fischer, H., Mascarenhas, Y. P., Craievich, A. F., Colnago, L. A. **Journal of Agricultural and Food Chemistry, 52: 2382-5 (2004)**
48. Effect of urea on bovine serum albumin in aqueous and reverse micelle environments investigated by small angle X-ray scattering, fluorescence and circular dichroism. Itri, R., Caetano, W., Barbosa, L. R. S., Baptista, M. S. **Brazilian Journal of Physics, 34: 58-63 (2004)**
49. Mesoscopic structure in the chain-melting regime of anionic phospholipid vesicles: DMPG. Riske, K. A., Amaral, L. Q., Döbereiner, H.-G., Lamy, M. T. **Biophysical Journal, 86: 3722-33 (2004)**
50. Effect of presence of an acid catalyst on structure and properties of iron-doped siloxane-polyoxyethylene nanocomposites prepared by sol-gel. L. A. Chiavacci, K. Dahmouche, N. J. O. Silva, L. D. Carlos, V. S. Amaral, V. de Zea Bermudez, S. H. Pulcinelli, C. V. Santilli, V. Briois, A. F. Craievich. **Journal of Non-Crystalline Solids, 345-346: 585-90 (2004)**
51. Small-angle X-ray scattering study of chiral side chain liquid crystalline polymers in 5CB and 8CB solvents. Pereira, F. V., Borsali, R., Merlo, A. A., Silveria, N. P. **Liquid Crystals, 31: 655-61 (2004)**
52. Isothermal aggregation of Ag atoms in sodium borate glass. Kellermann, G., Craievich, A. F. **Physical Review B, 70: 054106-1-7 (2004)**
53. Bovine serum albumin (BSA) plays a role in the size of SDS micelle-like aggregates at the saturation binding: the ionic strength effect. Schweitzer, B., Zanette, D., Itri, R. **Journal of Colloid and Interface Science, 277: 285-91 (2004)**
54. Characterization of poly(vinyl alcohol)/poly(ethylene glycol) hydrogels and PVA-derived hybrids by small-angle X-ray scattering and FTIR spectroscopy. Mansur, H. S., Oréfice, R. L., Mansur, A. A. P. **Polymer, 45: 7193-202 (2004)**

55. Aggregation of a benzoporphyrin derivative in water/organic solvent mixtures: a mechanistic proposition. Simplicio, F. I., Soares, R. R. da S., Maionchi, F., Santin Filho, O., Hioka, N. **Journal of Physical Chemistry A**, **108**: 9384-9 (2004)
56. Bulk structure of the (inverted) sponge phase of the lyotropic mixture of sodium dodecyl sulfate, 1-pentanol, water, and cyclohexane. Magalhães, M., Figueiredo Neto, A. M., Tromba, A. C. **Journal of Physical Chemistry B**, **108**: 15962-8 (2004)
57. Small-angle X-ray scattering and electron paramagnetic resonance study of the interaction of bovine serum albumin with ionic surfactants. Gelamo, E. L., Itri, R., Alonso, A., Silva, J. V. da, Tabak, M. **Journal of Colloid and Interface Science**, **277**: 471-82 (2004)
58. Small angle X-ray scattering (SAXS) study of the extracellular hemoglobin of *Glossoscolex paulistus*: effect of pH, iron oxidation state and interaction with anionic SDS surfactant. Gelamo, E. L., Itri, R., Tabak, M. **Journal of Biological Chemistry**, **279**: 33298-305 (2004)
59. Spectroscopic characterization and structural modeling of prolamin from maize and pearl millet. Bugs, M. R., Forato, L. A., Bortoleto-Bugs, R. K., Fischer, H., Mascarenhas, Y. P., Ward, R. J., Colnago, L. A. **European Biophysics Journal**, **33**: 335-43 (2004)
60. Highly ordered hybrid mesoporous bifunctional thin films. Soler-Illia, G. J. A. A., Angelomé, P. C., Bozzano, P. **Chemical Communications**, (24): 2854-5 (2004)
61. Crystalline properties and morphological changes in plastically deformed isotactic polypropylene evaluated by X-ray diffraction and transmission electron microscopy. Machado, G., Denardin, J. C., Kinast, E. J., Gonçalves, M. C., Luca, M. A. de, Teixeira, S. R. **European Polymer Journal**, **41**: 129-38 (2005)
62. The effect of poly(ethylene glycol) on the activity, structural conformation and stability of yeast hexokinase. Pancera, S. M., Petri, D. F. S., Itri, R. **Progress in Colloid and Polymer Science**, **128**: 178-81 (2004)
63. Synchrotron radiation multiple diffraction in the characterization of the PrAl₂ magnetocaloric compound. Santos, A. O. dos, Campoy, J. C. P., Coelho, A. A., Gama, S., Cardoso, L. P. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **272-276**: 2154-6 (2004)
64. Crystal structures of some manganese(II) and cadmium hexacyanoferrates (II, III) and structural transformations related to the sorption of Cesium. Martínez-García, R., Reguera, E., Rodriguez, J., Balmaseda, J., Roque, J. **Powder Diffraction**, **19**: 255-64 (2004)
65. On the crystal structures of some nickel hexacyanoferrates (II, III). Martínez-García, R., Reguera, E., Balmaseda, J., Ramos, G., Yee-Madeira, H. **Powder Diffraction**, **19**: 284-91 (2004)
66. Modeling the atomic structure of an amorphous Co₂₅Nb₇₅ alloy produced by mechanical alloying using an additive hard sphere model and RMC simulations. Machado, K. D., Lima, J. C., Campos, C. E. M., Grandi, T. A., Gasperini, A. A. M. **Chemical Physics Letters**, **384**: 386-90 (2004)
67. Synthesis and acidic properties of the SiO₂/SnO₂ mixed oxides obtained by the sol-gel process. Evaluation of immobilized copper hexacyanoferrate as an electrochemical probe. Cardoso, W. S., Francisco, M. S. P., Lucho, A. M. S., Gushikem, Y. **Solid State Ionics**, **167**: 165-73 (2004)
68. Spectroscopic characterization of doped poly(benzidine) and its nanocomposite with cationic clay. Nascimento, G. M. do, Constantino, V. R. L., Temperini, M. L. A. **Journal of Physical Chemistry B**, **108**: 5564-71 (2004)

69. A specific C-terminal deletion in tropomyosin results in a stronger head-to-tail interaction and increased polymerization. Paulucci, A. A., Katsuyama, A. M., Sousa, A. D., Farah, C. S. **European Journal Biochemistry**, **271**: 589-600 (2004)
70. Pt-Co/C electrocatalysts for oxygen reduction in H₂/O₂ PEMFCs synthesized by borohydride method. Salgado, J. R. C., Antolini, E., Gonzalez, E. R. **Journal of the Electrochemical Society**, **151**: A2143-9 (2004)
71. Layered H₂K₂Nb₆O₁₇ exfoliation promoted by n-butylamine. Bizeto, M. A., Constantino, V. R. L. **Materials Research Bulletin**, **39**: 1811-20 (2004)
72. Influence of LiClO₄ on the thermal, mechanical, and morphological properties of P(DMS-co-EO)/P(EPI-co-EO) blends. Fonseca, C. P., Guedes, C. G. F., Rosa, D. S., Neves, S. **Journal of Applied Polymer Science**, **93**: 1230-5 (2004)
73. Carbon nanotubes growth by chemical vapor deposition using thin film nickel catalyst. Moshkalyov, S. A., Moreau, A. L. D., Gutiérrez, H. R., Cotta, M. A., Swart, J. W. **Materials Science and Engineering B-Solid State and Adv Tech**, **112**: 147-53 (2004)
74. Nanostructured diamond and diamond-like materials for application in field-emission devices. Baranauskas, V., Fontana, M., Ceragioli, H. J., Peterlevitz, A. C. **Nanotechnology**, **15**: S678-S83 (2004)
75. HI-PS technique for MEMS fabrication. Dantas, M. O. S., Galeazzo, E., Peres, H. E. M., Ramirez-Fernandez, F. J., Errachid, A. **Sensors and Actuators A-Physical**, **115**: 608-16 (2004)
76. Synthetic melanin thin films: structural and electrical properties. Silva, M. I. N. da, Dezidério, S. N., Gonzalez, J. C., Graeff, M. S. Z., Cotta, M. A. **Journal of Applied Physics**, **96**: 5803-7 (2004)
77. Rapid method for evaluating reversed-phase high-performance liquid chromatography column stability. Fonseca, D. A., Gutiérrez, H. R., Collins, K. E., Collins, C. **Journal of Chromatography A**, **1030**: 149-55 (2004)
78. Titanized silica-based stationary phases prepared with thermally and microwave-immobilized poly(methyloctylsiloxane). Fonseca, D. A., Collins, K. E., Collins, C. H. **Journal of Chromatography A**, **1030**: 209-15 (2004)
79. Thin films of synthetic melanin. Dezidério, S. N., Brunello, C. A., Silva, M. I. N. da, Cotta, M. A., Graeff, M. S. Z. **Journal of Non-Crystalline Solids**, **338-340**: 634-8 (2004)
80. Photoluminescence from Si nanocrystals induced by high-temperature implantation in SiO₂. Sias, U. S., Moreira, E. C., Ribeiro, E., Boudinov, H., Amaral, L., Behar, M. **Journal of Applied Physics**, **95**: 5053-9 (2004)
81. TEM and PL characterization of erbium and oxygen co-implanted LT-GaAs:Be. Maltez, R. L., Ribeiro, E., Bernussi, A. A., Amaral, L., Behar, M., Specht, P., Lillental-Weber, Z. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, **218**: 444-50 (2004)
82. The influence of the implantation temperature on the photoluminescence characteristics of Si nanocrystals embedded into SiO₂ matrix. Sias, U. S., Moreira, E. C., Ribeiro, E., Boudinov, H., Amaral, L., Behar, M. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, **218**: 405-9 (2004)
83. Optical and structural properties of GaAs/GaInP quantum wells grown by chemical beam epitaxy. Martins, M. R., Oliveira, J. B. B. de, Tabata, A., Laureto, E., Bettini, J., Meneses, E. A., Carvalho, M. M. G. de. **Brazilian Journal of Physics**, **34**: 620-2 (2004)

84. Synthesis, characterization, and permeability evaluation of hybrid organic-inorganic films 1483 José, N. M., Prado, L. A. S. A., Yoshida, I. V. P. **Journal of Polymer Science B - Polymer Physics**, **42: 4281-92 (2004)**
85. Elemental mapping of teeth using USRXRF. Anjos, M. J. dos, Barroso, R. C., Perez, C. A., Braz, D., Moreira, S., Dias, K. R., Lopes, R. T. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, **213: 569-73 (2003)**
86. Evaluation of zirconium as a permanent chemical modifier using synchrotron radiation and imaging techniques for lithium determination in sediment slurry samples by ET AAS. Flores, A. V., Perez, C. A., Arruda, M. A. Z. **Talanta**, **62: 619-26 (2004)**
87. *Microscopic X-ray fluorescence analysis of human dental calculus using synchrotron radiation.* Perez, C. A., Sánchez, H. J., Barrea, R. A., Grenón, M., Abraham, J. **Journal of Analytical Atomic Spectrometry**, **19: 392-7 (2004)**
88. Barium L subshells Coster-Kronig and fluorescence yields by the subshell selective photoionization method. Barrea, R. A., Perez, C. A., Sánchez, H. J. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B**, **215: 308-16 (2004)**
89. Applications of SR-XRF to characterize biogels obtained by irradiation of aqueous biopolymers solutions. Perez, R. D., Rubio, M., Perez, C. A., Ausar, F., Beltramo, D., Germanier, A., Bianco, I. **Radiation Physics and Chemistry**, **71: 999-1000 (2004)**
90. A preliminary study of the distribution of trace elements in healthy and neoplastic breast tissues with synchrotron radiation X-ray fluorescence. Poletti, M. E., Gonçalves, O. D., Perez, C. A., Magalhães, S. D. **Radiation Physics and Chemistry**, **71: 975-6 (2004)**
91. *Alpha and Beta conformational preferences in fibril forming peptides characterised using NMR and CD techniques.* Pertinhez, T. A., Sherwood, A. K., Fraceto, L. F., Bouchard, M., Pitkeathly, M., Smith, L.J. **Spectroscopy**, **18: 1-11 (2004)**
92. Heteronuclear NMR investigations of dynamic regions of intact Escherichia coli ribosomes. Christodoulou, J., Larsson, G., Fucini, P., Connell, S. R., Pertinhez, T. A., Hanson, C. L., Redfield, C., Nierhaus, K. H., Robinson, C. V., Schleucher, J., Dobson, C. M. **Proceedings of the National Academy of Sciences USA**, **101: 10949-54 (2004)**
93. *Biaxial stress ring applications to magneto-optical studies of semiconductor films.* Godoy, M. P. F., Nakaema, M. K. K., Iikawa, F., Carvalho Jr., W., Ribeiro, E., Gobbi, A. L. **Review of Scientific Instruments**, **75: 1947-51 (2004)**
94. Femtosecond electron bunches from an RF-gun. Rimjaem, S., Farias R.H.A., Thongbai, C., Vilaithong, T., Wiedemann, H. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, **533: 258-69 (2004)**
95. Comprehensive spectroscopic study of nitrogenated carbon nanotubes. Droppa Jr., R., Ribeiro, C.T.M., Zanatta, A.R., Santos, M.C. dos, Alvarez, F. **Physical Review B**, **69: 04505-1-9 (2004)**
96. XPS and atomic force microscopy analyses of thin Au and Cu films on Pd. Maluf, S.S., Gobbi, A.L., Paulin-Filho, P.I., Nascente, P.A.P. **Surface and Interface Analysis**, **36:931-4 (2004)**.
97. EDXRF analysis of red and white wines from Brazil. Anjos, M.J. dos, Barroso, R.C., Lopes, R.T., Jesus, E.F.O. de, Simambuco, S.M., Castro, C.R.F. **X Ray Spectrometry**, **33:407-9 (2004)**

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2004

98. Use of amorphous hydrogenated carbon as high-pressure cell for investigating trapped noble gases as a function of pressure. Oliveira Jr., M.H., Barbieri, P.F., Lacerda, R.G., Marques, F.C. **Thin Solid Films, 469-470:112-4 (2004)**
99. X-ray multiple diffraction on the shallow junction of B in Si(001) . Orloski, R.V., Swart, J.W., Cardoso, L.P. **Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 228:177-82 (2004)**
100. Synthesis and acidic properties of the SiO₂/SnO₂ mixed oxides obtained by the sol-gel process. Evaluation of immobilized copper hexacyanoferrate as an electrochemical probe. Cardoso, W.S., Francisco, M.S.P., Lucho, A M.S., Gushikem, Y. **Solid State Ionics, 167:165-73 (2004)**