

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

MEMBROS DO CONSELHO DE ADMINISTRAÇÃO DA ABTLuS

Rogério Cezar de Cerqueira Leite
(Presidente)

Adalberto Vasquez

Antonio Rubens Britto de Castro

Celso Antônio Barbosa

Celso Varga

Cláudio Rodrigues

Cylon E. T. Gonçalves da Silva

João Evangelista Steiner

Roberto Nicolau Jeha

Waldimir Pirró e Longo

Fernando Cláudio Zawislak

DIRETORIA DA ABTLuS

Diretor Geral
José Antônio Brum

Diretor Associado
Pedro Fernandes Tavares

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

CONTEÚDO

A	SUMÁRIO EXECUTIVO	5
1.	P, D & I com Luz Síncrotron	7
1.1	Fonte de Luz Síncrotron	7
1.2	Manutenção das Linhas de Luz	10
1.3	Melhoramentos nas Linhas de Luz	11
1.4	Implementar Novas Linhas de Luz	12
1.5	Uso das Linhas de Luz	13
2.	P, D & I em Micro e Nano-Tecnologia	17
-		
2.1	Manutenção da Infra-estrutura	17
2.2	Melhoramentos da infra-estrutura	17
2.3	Apoio aos Pesquisadores Externos	18
3.	P, D & I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia	23
3.1	Manutenção e Melhoria da Infra-estrutura	23
3.2	Apoiar Pesquisadores Externos com a Infra-Estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia	24
3.3	Pesquisa Realizada por membros do CEBIME em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia	28
4.	P, D & I em Aceleradores	29
4.1	Melhoramentos no Anel de Armazenamento	29
4.2	Dispositivos de Inserção	30
5.	Transferência de Tecnologia	31
6.	Informação, Educação E Divulgação	33
6.1	Informação Científica e Administrativa	33
6.2	Educação e Produção Científica	33
6.3	Divulgação	37
7.	Gestão e Planejamento	38
7.1	Relatório Financeiro	38
C.	INDICADORES DE DESEMPENHO	42
D.	CONCLUSÃO	50
E.	APÊNDICES	51
E.1	Publicações	52
E.2	Parecer dos Auditores Independentes	64

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

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Parâmetros de Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron em 2003--	9
Tabela 2	Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2003-----	9
Tabela 3	Linhas de Luz do LNLS em Operação para Usuários-----	10
Tabela 4	Melhoramentos nas Linhas de Luz -----	11
Tabela 5	Linhas de Luz do LNLS em Construção ou Projetadas-----	12
Tabela 6	Propostas de Pesquisa nas Linhas de Luz-----	14
Tabela 7	Distribuição Geográfica das Propostas de Pesquisa nas Linhas de Luz-----	15
Tabela 8	Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede de Biologia Molecular Estrutural do estado de São Paulo -----	25
Tabela 9	Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede Nacional de Molecular Estrutural-----	26
Tabela 10	Pesquisadores da ABTLUS-----	35
Tabela 11	Alunos de pós-graduação sob orientação-----	36
Tabela 12	Pós-doutores sob supervisão-----	37
Tabela 13	Cursos realizados durante o primeiro semestre de 2003-----	37
Tabela 14	Orçamento da ABTLuS-----	39
Tabela 15	Recursos Totais ABTLuS-----	41
Tabela 16	Quadro de indicadores-----	42

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

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1	Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron-----	8
Gráfico 2	Histórico dos Auxílios concedidos-----	15
Gráfico 3	Evolução do números de Propostas de Pesquisas nas linhas de luz-	16
Gráfico 4	Distribuição dos Propostas de Pesquisa no LME-----	18
Gráfico 5	Perfil dos Usuários no LME-----	19
Gráfico 6	Horas de operação por microscópio-----	19
Gráfico 7	Utilização do Laboratório de Microfabricação-----	21
Gráfico 8	Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear 500 MHz-----	27
Gráfico 9	Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear 600 MHz-----	27
Gráfico 10	Orçamento do Contrato de Gestão ABTLuS-----	39
Gráfico 11	Repasse e Gastos do Contrato de Gestão 2003-----	39

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

SUMÁRIO EXECUTIVO

O Objetivo deste Relatório Semestral de 2003 é de apresentar um acompanhamento das atividades, por ordem dos Programas, do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron – LNLS, operado pela Organização Social Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron – ABTLuS por meio do Contrato de Gestão firmado com o Ministério de Ciência e Tecnologia – MCT e o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq.

O 8º Termo Aditivo do Contrato de Gestão foi assinado em Março com valores da ordem de 16% inferiores ao previsto no Orçamento da União por imposição dos limites financeiros estabelecidos para o MCT. A ABTLuS optou por operar normalmente, com a expectativa de recompor o orçamento previsto ao longo do ano. Com isto, não houve repactuação dos Indicadores previstos para o ano de 2003.

O 1º semestre de 2003 caracterizou-se pelo funcionamento normal de todas as instalações do LNLS. Destacam-se o comissionamento de uma nova linha de luz – DXAS - e a conclusão da construção da 12ª linha de luz - XPD, que encontra-se na fase final de instalação. Outras quatro linhas de luz encontram-se em diferentes estágios de planejamento ou construção. Com a conclusão destas linhas de luz, a expectativa é operar 16 linhas de luz em 2004. Foram realizadas várias implementações e reformas no anel de armazenamento o que, entre outras melhorias, permitirá a instalação de dispositivos de inserção. Os trabalhos de construção do *wiggler* pela STI-Optronics encontram-se avançados e a equipe do LNLS tem interagido ativamente neste processo. Prosseguem os trabalhos de construção do protótipo do ondulador. Destacamos ainda a realização do primeiro modo de operação para usuários tipo *single-bunch*, onde a estrutura temporal dos pacotes de elétrons é utilizada no experimento. Embora este modo de operação, pelas suas características, deva ser utilizado apenas em situações especiais, ele representa um avanço qualitativo nas capacidades que o LNLS disponibiliza para os usuários.

Neste primeiro semestre começamos a instalação do Laboratório de Filmes Finos, que deve ser concluído ao longo deste ano, utilizando os equipamentos cedidos pelo CPqD.

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

A Rede Nacional de Biologia Molecular, embora com recursos limitados, começou a operar efetivamente, tendo já sido realizado um curso de treinamento e vários trabalhos no CEBIME envolvendo pesquisadores da Rede. O Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear começou a operar como instalação aberta. A instalação do Laboratório de Espectroscopia de Massa foi concluída e os primeiros experimentos já estão sendo realizados.

No aspecto de divulgação e formação, destacamos a realização de uma primeira experiência de um curso multidisciplinar, na graduação, juntamente com a Universidade Estadual de Campinas, utilizando as instalações de pesquisa do LNLS.

A seguir, destacamos as principais realizações no 1o. semestre de 2003:

[1] A conclusão do comissionamento da linha de luz de absorção dispersiva (DXAS);

[2] A confiabilidade da Fonte de Luz Síncrotron que atingiu 97,8% superando o valor pactuado, confirmando a possibilidade de operar a máquina em regime de operação contínua;

[3] A introdução de um novo modo de operação da fonte de luz síncrotron: o modo single-bunch ou modo de operação em pacote único;

[4] A execução de 245 propostas de pesquisa nas diversas instalações abertas do LNLS;

[5] A realização da XIII Reunião Anual de Usuários, com mais de 300 participantes inscritos com a apresentação de mais de 200 trabalhos científicos realizados com uso das instalações disponíveis no LNLS;

[6] A publicação de 25 artigos em revistas indexados pelos pesquisadores do quadro científico do LNLS, juntamente com colaboradores;

[7] A realização do 12o. Programa de Verão com 15 estudantes realizando projetos científicos nas instalações do LNLS.

[8] A realização da 5a. reunião do Comitê Técnico-Científico do LNLS.

Programa 1: P, D & I com Luz Síncrotron
1.1 – Fonte de Luz Síncrotron

A fonte de luz síncrotron operou todos os meses do primeiro semestre de 2003, exceto por uma parada de três semanas, no mês de junho, para instalações preparatórias da ampliação do sistema de RF do anel de armazenamento, que deverá ocorrer no final deste ano. Foram fornecidas 2082 horas de feixe para usuários, sendo 2006 horas durante turnos programados e 76 horas em turnos extraordinários (Tabela 1) indicando que a realização das 3000 horas programadas, para o ano de 2003, não deve apresentar dificuldades. Dando prosseguimento à bem sucedida experiência do segundo semestre de 2002, neste primeiro semestre de 2003 a fonte de luz operou em regime contínuo, funcionando 24 horas por dia nos dias de semana e interrompendo o serviço aos usuários somente nos fins de semana. Neste período, foram registradas 45 horas de falhas durante o horário programado, resultando num índice de confiabilidade de 98%, ultrapassando o índice de 93% pactuado para este ano e confirmando a possibilidade de operar a máquina em regime de operação contínua. O detalhamento do uso da Fonte de Luz Síncrotron encontra-se na Tabela 2.

Uma novidade importante introduzida em 2003 foi o oferecimento aos usuários de um novo modo de operação da fonte de luz síncrotron: o modo *single-bunch* ou modo de operação em pacote único. Neste modo de funcionamento (que é solicitado por pesquisadores interessados em espectroscopia de tempo de voo e outras técnicas resolvidas no tempo), apenas um entre 148 possíveis *pacotes* de elétrons são efetivamente preenchidos. A corrente média total armazenada no anel, neste modo, é obviamente muito menor que no modo convencional de operação (modo com muitos pacotes ou *multi-bunch*), ainda que a corrente por pacote seja muito maior. Os dois modos são mutuamente exclusivos e os turnos agendados para o modo *single-bunch* podem ser usados com eficácia apenas por algumas linhas de luz. Em função disso e tendo em vista a grande demanda por tempo de feixe no modo convencional, o agendamento de turnos em modo *single-bunch* foi feito em 2003 de forma a concentrar todos os usuários nele interessados em um único período de duas semanas, no mês de março. Foram dedicados à operação *single-bunch*, atendendo a solicitação de três diferentes grupos de pesquisa (grupos da UNICAMP/LNLS, UFRJ e UFSCar), um total de 190 horas de feixe no modo *single-bunch* tendo sido alcançado um índice de confiabilidade de 95.9%, muito próximo dos valores típicos no modo *multi-bunch*. A única diferença operacional importante para os

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

usuários neste modo foi um alongamento do tempo de injeção tipicamente por um fator dois.

A introdução do modo *single-bunch* neste ano teve efeito sobre vários dos indicadores do Contrato de Gestão associados à fonte de luz síncrotron. De fato, no cálculo do número de horas-linha fornecidas, as horas de modo *single-bunch* contribuem com apenas três linhas enquanto que todas as 10 linhas estavam em operação no modo *multi-bunch*. Além disso, o novo indicador de desempenho da fonte (introduzido na tabela de indicadores do Contrato de Gestão a partir de 2003) necessitaria de revisão para poder servir de instrumento de análise, no caso do modo *single-bunch*. Isto ocorre porque este indicador é definido, basicamente, pela comparação da intensidade do feixe efetivamente entregue com uma intensidade de referência. A intensidade no modo *single-bunch* é necessariamente muito menor que no modo convencional e temos que escolher uma nova referência. Sendo este o primeiro ano em que este modo é utilizado pelos usuários, e considerando ainda que ele ocupa apenas uma pequena fração do tempo total fornecido, decidimos por expurgar o modo *single-bunch* do cálculo do índice de desempenho da fonte de luz síncrotron para 2003. No restante dos indicadores, no entanto (e.g., no indicador de confiabilidade), o modo *single-bunch* foi considerado juntamente com o modo *multi-bunch*).

O desempenho da fonte registrado mês a mês, no Gráfico 1, mostra uma redução no mês de junho associado aos efeitos da abertura da câmara de vácuo necessária na parada já mencionada.

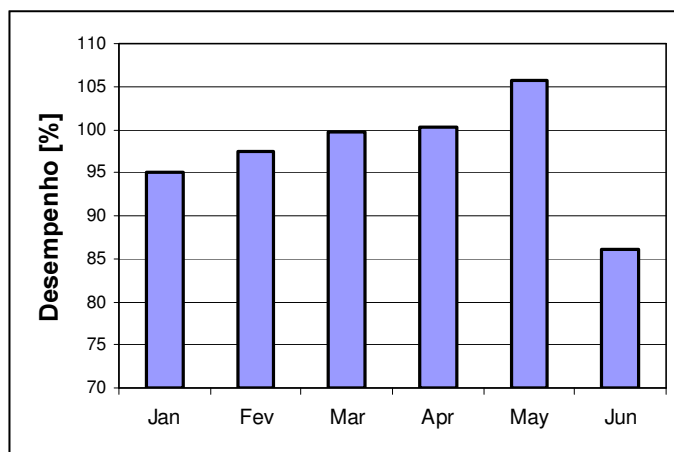


Gráfico 1: Desempenho da fonte de luz síncrotron no primeiro semestre de 2003.

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

Parâmetros de Desempenho Operacional da Fonte de Luz Síncrotron. no primeiro Semestre de 2003									
	Jan	Feb	Mar	Mar SB	Apr	May	Jun	Med/Tot	
Corrente Inicial Média	252	250	250	10	252	250	243	250	mA
Corrente Média	149	152	156	6	155	170	130	155	mA
Tempo de Vida Médio	9.5	10.9	11.9	10.9	12.4	13.0	8.2	11.3	h
Corrente Integrada	59.3	51.7	29.1	1.1	70.2	66.6	16.2	294	A.h
Tempo de Feixe Programado	389	330	184	189	443	390	128	2051	h
Tempo de Feixe durante o horário programado	379	323	177	181	440	383	123	2006	h
Tempo Total de Feixe	398	339	187	190	452	392	124	2082	h
Confiabilidade	97.6	97.9	96.5	95.9	99.3	98.2	96.1	97.8	%
Desempenho	95.0	97.4	99.8	ND	100.2	105.7	86.0	98.8	%

Tabela 1: Parâmetros da Fonte de Luz Síncrotron no 1º semestre de 2003.

Uso da Fonte de Luz Síncrotron no primeiro semestre de 2003 [horas].									
	Jan	Feb	Mar	Mar SB	Apr	May	Jun	Tot	%
Usuários	398	339	187	190	452	392	124	2082	47.9%
Injeção	18	13	7	21	20	16	10	105	2.4%
Estudos de Máquina	60	92	61	27	65	54	101	461	10.6%
Manutenção	34	47	9	18	3	41	90	244	5.6%
Comissionamento	0	2	0	0	0	0	273	275	6.3%
Máquina Desligada	225	172	113	97	176	233	116	1132	26.1%
Falha	9	7	6	8	3	7	5	45	1.0%
Total	744	672	384	360	720	744	720	4344	100.0%
Grau de Saturação	70%	74%	70%	73%	76%	69%	84%	74%	
Número de Dias	31	28	16	15	30	31	30	181	

Tabela 2: Uso da Fonte de Luz Síncrotron no 1º semestre de 2003.

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

1.2 – Manutenção das Linhas de Luz

Um total de dez linhas de luz foram mantidas em operação durante o primeiro semestre de 2003. Além disto, uma nova linha de luz foi comissionada e estará disponível para os usuários a partir do 2º semestre de 2003. Esta é a linha do dipolo D06A, de absorção de raios-x dispersiva, utilizando um cristal único focalizante e será utilizada para ciência dos materiais, estudos *in-situ* e dicroísmo magnético. A primeira rodada de julgamento de projetos de usuários foi realizada em Maio de 2003 e os projetos aprovados estão agendados para o segundo semestre de 2003.

A lista dessas linhas de luz está descrita na Tabela 3. A primeira coluna indica em qual dipolo do anel a linha está localizada e a sua denominação. A segunda coluna indica o monocromador e o domínio de energia para o qual a linha está otimizada. A terceira coluna indica as áreas de aplicações.

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

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

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

1.3 – Melhoramentos nas Linhas de Luz

Apresentamos na Tabela 4 vários melhoramentos realizados na instrumentação das linhas de luz que estiveram em operação durante o 1º semestre de 2003.

Linha de Luz	Melhoramentos	Objetivo
D03B: Cristalografia de Proteínas (CPR)	<ul style="list-style-type: none"> • Colocação do espelho no feixe e alinhamento dos elementos óticos da linha; • Colocação de uma nova janela de berílio refrigerada para isolar a câmara do espelho do front-end; • Instalação de um computador com gravador de DVD para gravar arquivos de dados do novo detetor Mar345. 	<ul style="list-style-type: none"> • O espelho leva a um ganho de fluxo de um fator 5; • Evitar risco de vazamento; • Permitir transferência de dados dos usuários para seu local de trabalho fixo.
D04A: Espectroscopia de Raios X Moles (SXS)	<ul style="list-style-type: none"> • Câmara para introdução de amostras comissionada; • Cristal de quartzo adquirido; • Espelho retirado para substituição da cobertura de ouro por ródio. 	<ul style="list-style-type: none"> • Tratamento e transferência rápida de amostras; • Permitir medidas na borda do alumínio; • Aumentar a energia de trabalho da linha até 3 KeV .
D04B: Espectroscopia de Absorção de Raios X (XAS1)	<ul style="list-style-type: none"> • Modificação no porta-amostra do detetor de elétrons; • Instalação de uma nova mesa experimental; • Aquisição de um novo criostato de ciclo fechado. 	<ul style="list-style-type: none"> • Facilitar alinhamento e acomodar um maior número de amostras na câmara; • Facilitar o posicionamento e alinhamento dos equipamentos de medidas; • Substituir o criostato da linha.
D05A: Espectroscopia de Ultra-Violeta (TGM)	<ul style="list-style-type: none"> • Melhorias nas eletrônicas (melhor resolução) das fendas polarizadoras; • Desenvolvimento da eletrônica e toda a interface necessária para operar em modo "single bunch"; • Aquisição de novos detetores MCP. 	<ul style="list-style-type: none"> • Seleção, via computador, de luz síncrotron circularmente polarizada na câmara de amostras; • Permitir medidas em função do tempo; • Permitir medidas mais rápidas dos usuários.
D06B: Litografia de Raios X (XRL)	<ul style="list-style-type: none"> • Nenhuma melhoria realizada no período. 	
D08A: Espectroscopia de Raios X Moles e Ultra-Violeta (SGM)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de duas novas bombas iônicas no trecho de diagnóstico; • Melhorias no software de aquisição; • Testou-se o monitor de feixe de fótons; • Desenvolvimento da eletrônica e toda a interface necessária para operar em modo "single bunch". 	<ul style="list-style-type: none"> • Para recuperação do vácuo após a saída de uma câmara de amostras; • Permitir acionar vários equipamentos simultaneamente; • Verificamos eventuais flutuações no anel; • Permitir medidas em função do tempo.
D09A: Fluorescência de Raios X (XRF)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de janela de berílio no final da linha ; • Substituição de rolamentos e fita entre translador externo e mecânica interna do monocromador. 	<ul style="list-style-type: none"> • Permitir acoplamento da câmara de vácuo da estação de reflexão externa total; • Otimizar a reprodutibilidade e performance do monocromador.

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

Linha de Luz	Melhoramentos	Objetivo
D10A: Espalhamento e Difração Magnética (XRD2)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação de janelas de berílio refrigeradas; • Instalação do espelho de raios-x para focalização meridional; • Instalação de monocromador sagital com refrigeração; • Nova cabana experimental. 	<ul style="list-style-type: none"> • Melhorar o sistema de vácuo e a segurança da linha; • Eliminação de harmônicos e ganho de um fator 5 em fluxo; • Maior estabilidade e linearidade do monocromador e diminuição da carga térmica; • Melhor proteção aos usuários.
D11A: Espalhamento de Raios X a Baixo Ângulo (SAXS)	<ul style="list-style-type: none"> • Implementação e uso do calorímetro (DSC); • Desenvolvido um novo sistema de cápsulas para líquidos; • Melhorias do sistema de porta amostras da câmara WAXS/SAXS. 	<ul style="list-style-type: none"> • Medir simultaneamente DSC e SAXS; • Permitir medidas de líquidos com capilares de 1 mm; • Medidas simultâneas de alto e baixo ângulo.
D12A: Difração de Raios X (XRD1)	<ul style="list-style-type: none"> • Instalação do novo monocromador focalizante na linha; • Controle de temperatura do monocromador; • Modificações na interface de controle do goniômetro Huber. 	<ul style="list-style-type: none"> • Possibilitar ganho em fluxo e estabilidade; • Melhorar a estabilidade em fluxo, energia do feixe; • Melhorar a interface de varreduras e coleta de dados.

Tabela 4: Melhoramentos nas Linhas de Luz

Além disso, novos componentes padrão puderam ser testados, como por exemplo as novas fendas e janelas refrigeradas e várias câmaras de espelho desenvolvidas e construídas no LNLS. Foi concluída também a montagem para experimentos com átomos frios na fonte de luz síncrotron realizados no período de operação no modo *single-bunch* em março.

1.4 – Implementar Novas Linhas de Luz

A lista das linhas de luz planejadas, em construção ou sendo comissionadas segue na Tabela 5.

Linhas de Luz	Monocromador	Aplicações	Planejamento	Recurso
W01A: Wiggler multipolar para Cristalografia de Proteínas	Duplo-cristal focalizante 6 – 15 keV	Biologia estrutural usando a técnica MAD.	Em construção	FAPESP
D02A: Espalhamento de raios X a Baixo Ângulo II	Cristal único focalizante 6 – 12 keV	Vidros e nanocristais, polímeros, aplicações em biologia estrutural.	Em construção	ABTLuS
D02B: Difração de raios X em policristais	Duplo-cristal focalizante 4 – 15 keV	Estudos estruturais por difração em policristais.	Comissionamento	CT-INFRA I
D05B: Fluorescência UV para biologia	Espelhos para UV	Biologia molecular.	Em construção	FAPESP

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

Linhas de Luz	Monocromador	Aplicações	Planejamento	Recurso
D08B: Espectroscopia de Absorção de raios X II	Duplo-cristal focalizante 4 – 15 keV	Ciências dos materiais, filmes finos e sistemas diluídos.	Projetar	CT-INFRA III
U11: Ondulador para Espectroscopia VUV de alta resolução	Grade plana (PGM) 100 – 1200 eV	Superfície e interfaces; Física atômica e molecular; Dicroísmo circular magnético.	Projetar	Não definido

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

As linhas planejadas encontram-se em diferentes estágios de desenvolvimento. Para a linha de Cristalografia de Proteínas (W01A) o dispositivo de inserção está em construção e a óptica já foi planejada. Algumas peças já foram construídas. A continuidade depende da aquisição dos elementos óticos. A linha de Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo encontra-se em fase final de construção restando apenas o projeto da mesa de medidas a ser colocada após o monocromador.

A linha de Difração de Raios-X em Policristais encontra-se em fase final de instalação e será comissionada no segundo semestre de 2003. A linha de Fluorescência UV para biologia aguarda a liberação da parte final dos recursos aprovados pela FAPESP. A linha de Espectroscopia de Raios-x II, que deverá ter um fluxo 10 vezes maior do que a linha I, será projetada e construída no segundo semestre de 2003, com elementos padrão já realizados nas outras linhas de luz.

A linha de ondulador para espectroscopia VUV encontra-se ainda em fase de definição de projeto, o que deverá ser realizado no segundo semestre de 2003. O protótipo de ondulador encontra-se em construção.

1.5 – Uso das Linhas de Luz

Durante o primeiro semestre de 2003 foram realizados 171 propostas de pesquisas em 9 linhas de luz, por mais de 360 pesquisadores usuários (responsáveis e colaboradores) utilizando as instalações das linhas de luz. A distribuição dos projetos realizados durante o 1º semestre por linha de luz pode ser observado na Tabela 6.

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

Linha (1ºs 2003)	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	XRF	XRL	Total
Total realizado nas Linhas	33	28	29	13	9	26	6	12	15	0	171
Por país:	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	XRF	XRL	Total
Brasil	30	25	22	11	9	26	5	8	14	0	150
Argentina	3	1	6				1	3	1		15
México		1	1								2
Austrália								1			1
Cuba				1							1
Estados Unidos da América		1									1
Uruguai				1							1
Total	33	28	29	13	9	26	6	12	15	0	171
Por área de pesquisa :	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	XRF	XRL	Total
Física da Matéria Condensada		17	5	5	6	13	1	5	1		53
Biologia Molecular Estrutural	32		2								34
Físico-química		2	10		1	5		3	1		22
Ciência dos Materiais		3	4	4	1			3	1		16
Física Atômica e Molecular						7	5	1			13
Biofísica	1	1	6						1		9
Ciências do Meio Ambiente									8		8
Engenharia de Materiais			2	3	1						6
Engenharia Química		1				1					2
Geoquímica		2									2
Química Analítica									2		2
Química Inorgânica		2									2
Física Aplicada				1							1
Física Geral									1		1
Total da Linha	33	28	29	13	9	26	6	12	15	0	171
Por estado / instituição brasileira:	CPR	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	XRF	XRL	Total
São Paulo	29	17	15	9	7	22	2	6	11	0	118
LNLS		9	2	4	1	8	2	2	1		29
UNICAMP		3	2	2	5	8		3	3		26
UNESP - São José Rio Preto	19										19
USP - São Paulo	2	3	4	1		3		1	1		15
USP- São Carlos	6	1	4	1					1		13
UNIMEP									4		4
UNESP - Araraquara		1				2					3
UFSCar			1		1	1					3
UNESP - Botucatu	2										2
Rhodia - Paulínia			2								2
FAENQUIL				1							1
USP - CENA									1		1
Bahia											1
UESC						1					1
Espírito Santo											2
UFES		2									2
Minas Gerais											7
UFMG		1	2	1	2						6
UFJF						1					1
Paraná											2
UEM	1										1
UEOP									1		1
Rio de Janeiro											10
CBPF						1					1
UERJ									1		1
UFRJ			2			1	3	1	1		8
Rio Grande do Sul											5
UFRGS		4	1								5
Santa Catarina											4
UFSC			2	1				1			4
Sergipe											1
UFSE		1									1
Total Geral	1	8	7	2	2	4	3	2	3	0	150

Tabela 6: Propostas de Pesquisas nas Linhas de Luz

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

Cerca de 88% das propostas realizadas nas linhas de luz se originaram no Brasil e 12% no exterior, com preponderância de usuários argentinos, neste último caso.

A Tabela 7 apresenta a evolução histórica do número de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 1997 e sua distribuição geográfica:

Origem	2º sem 97		1998		1999		2000		2001		2002		1º sem 03	
São Paulo	61	61%	138	61%	126	75%	93	65%	112	62%	138	60%	118	69%
Outros estados	29	29%	47	21%	16	9%	28	20%	42	23%	59	26%	32	19%
Outros países	10	10%	41	18%	27	16%	21	15%	47	15%	34	15%	21	12%
Total	100		226		169		142		201		231		171	

Tabela 7: Distribuição Geográfica das propostas de pesquisa nas linhas de luz.

Foram concedidos 86 auxílios, pelo Programa de Auxílio Financeiro para Pesquisadores de Instituições Brasileiras, para realização das propostas de pesquisa durante o primeiro semestre de 2003, contemplando a totalidade de propostas de outros Estados. O Programa de Auxílio Financeiro para pesquisadores de Instituições Latino-Americanas e Caribe, implementado em 2001, concedeu 25 auxílios para realização de aproximadamente 76% das propostas de pesquisas de outros países nas linhas de luz.

A evolução do número de auxílios concedidos pelos programas de financiamento do LNLS pode ser observada no Gráfico 2.

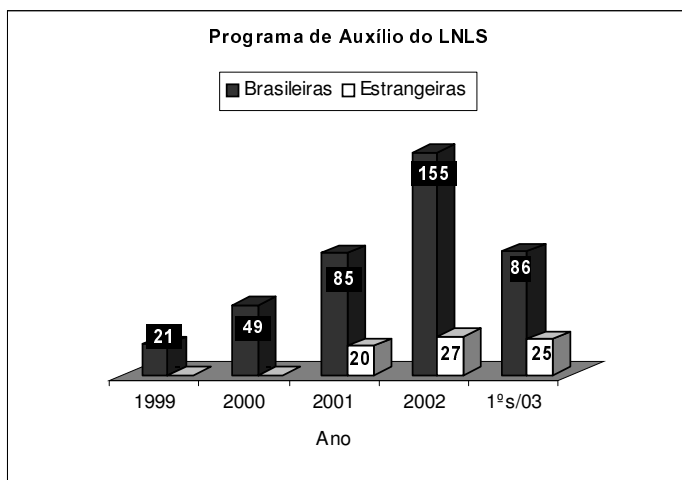


Gráfico 2: Histórico dos auxílios concedidos.

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

Por fim, o Gráfico 3 apresenta a evolução histórica semestral do números de propostas de pesquisas realizados nas linhas de luz desde 1997, onde observamos um forte aumento no número de propostas realizadas.

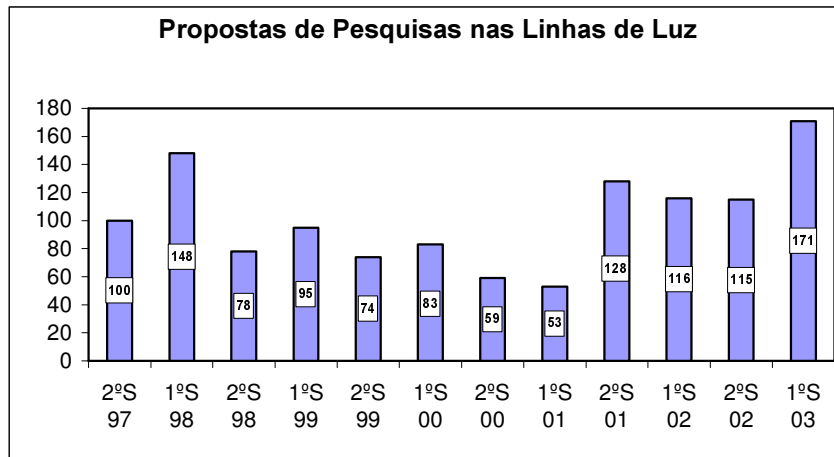


Gráfico 3: Evolução de número de propostas de pesquisas nas linhas de luz

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

A pesquisa, desenvolvimento e inovação em micro e nanotecnologia tem como objetivo prover e manter infra-estrutura de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação na área de novos materiais, em particular materiais nanoestruturados, abrangendo as atividades relacionadas diretamente aos usuários de microscopia eletrônica, microscopia de força atômica e microfabricação.

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

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

2.1 - Manutenção da Infra-estrutura

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

Durante o ano de 2002 e devido a situação financeira optou-se por não adquirir peças de reposição e outros consumáveis para os laboratórios (ex. microscópios). Estes itens foram encomendados em 2003, evitando assim comprometer o atendimento aos usuários devido a possíveis atrasos na manutenção dos equipamentos.

2.2 - Melhoramentos da Infra-estrutura

O Microscópio de Varredura em Baixo Vácuo (LV-SEM) apresentava uma limitação na operação em alto aumento devido a vibrações mecânicas, que poderia limitar seu uso como ferramenta de litografia eletrônica. Em vista desta situação, foi realizada uma obra para a instalação do microscópio sobre um bloco de concreto de 1,5 toneladas e isolado do piso do prédio. Esta operação resultou em uma parada técnica, de duas semanas de duração (em maio), período em que os usuários não tiveram acesso ao microscópio.

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

O Laboratório de Síntese Química foi reformado para possibilitar melhor circulação de pessoas e realização de trabalhos de forma mais segura (derrubada de paredes, duplicação da iluminação, troca do forro). Essa reforma também foi necessária para instalação de nova capela (prevista para agosto de 2003) que irá atender aos usuários do LME, que no momento estão utilizando a capela existente.

Parte dos equipamentos do CPqD cedidos sob regime de comodato, foram utilizados para a implementação de um laboratório de filmes finos e outro laboratório de espectroscopia ótica. No primeiro, está sendo operado em sistema de *sputtering* e no sistema de elipsometria; no segundo laboratório estão sendo implementadas as técnicas de fotocorrente, eletroluminescência e absorção. Estes laboratórios estão sendo coordenados pelo grupo MTA. Neste grupo foi projetado e construído um modelo de evaporadora compacta por feixe de elétrons. Também foi instalada uma câmara de evaporação em vácuo base de 1×10^{-7} Torr, com capacidade para 6 células de evaporação.

2.3 Apoio aos Pesquisadores Externos

Os microscópios eletrônicos têm sido intensamente utilizados pelos usuários. Eles se encontram próximos da saturação, o que tem sido temporariamente contornado com o aumento efetivo do horário acessível aos usuários. Foram realizadas 73 propostas de pesquisa no Laboratório de Microscopia Eletrônica, dos quais 58 externos e 15 internos, conforme apresentado no Gráfico 4.

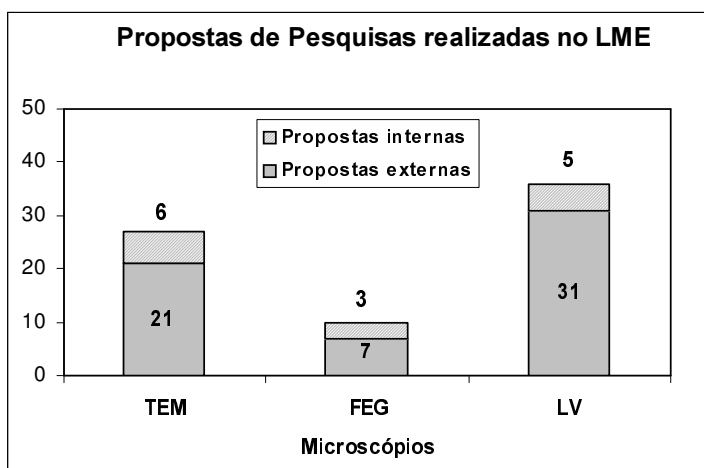


Gráfico 4: Distribuição das Propostas de Pesquisas no LME

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

Durante o primeiro semestre 2003 o LME recebeu 68 usuários, dos quais treinou 25 no uso dos diferentes equipamento, como vemos no Gráfico 5.

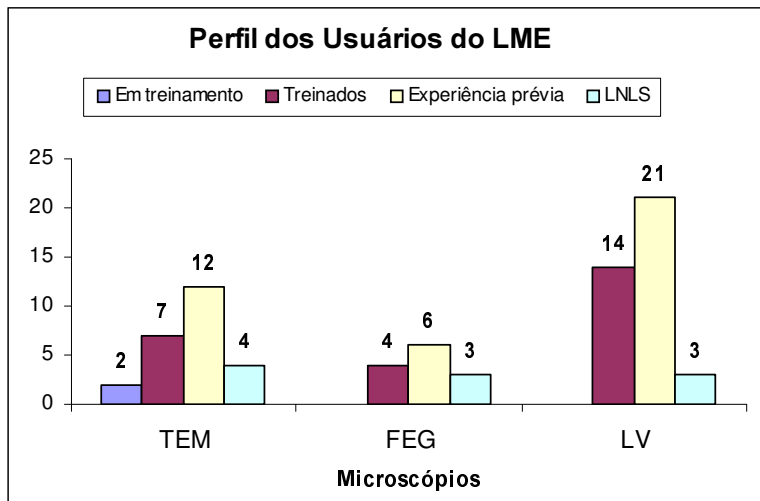


Gráfico 5: Perfil dos Usuários no LME

Os Microscópios foram intensamente utilizados. O incremento no número de horas de operação, em relação as previstas, deve-se a utilização dos instrumento durante a noite e finais de semana. O tempo total de uso destinado às propostas realizadas durante o primeiro semestre de 2003, está descrito por microscópio no Gráfico 6:

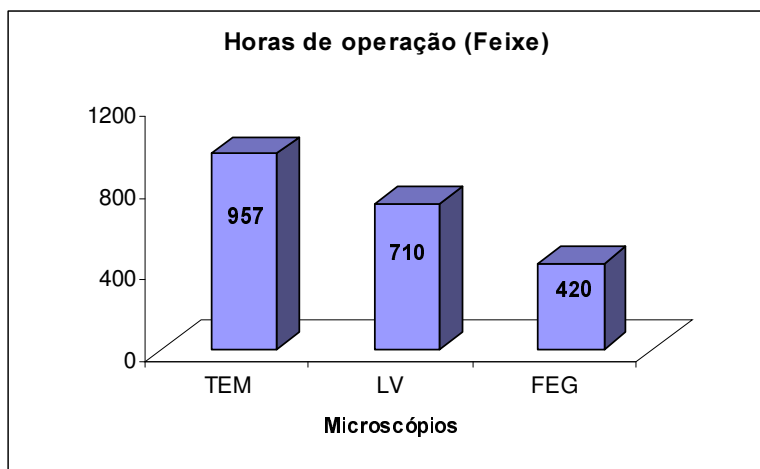


Gráfico 6: Horas de operação por microscópio

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

Dois outros microscópios encontram-se disponíveis para a utilização pelos usuários: um Microscópio de Força Atômica (AFM) e um Microscópio de Varredura por Tunelamento trabalhando em ultra-alto vácuo (UV-STM) (estes microscópios são operados pelo Grupo MTA). Ambos microscópios operam por solicitação, através de submissão de projetos diretamente ao coordenador dos equipamentos. O UV-STM tem uma forma de operação realizada em colaboração devido à complexidade do equipamento e à duração dos projetos.

O Laboratório de Síntese Química é um laboratório de pesquisa interno, financiado por um Projeto Jovem Pesquisador da FAPESP. Os principais equipamentos são uma caixa seca (dry-box), uma capela química e um Espectrofotômetro de Ultra-violeta/Visível. Além da sua pesquisa própria, ele deve prover também capacidade para produzir nanopartículas para diversos estudos, tarefa que já se iniciou.

Nesse Laboratório trabalharam rotineiramente nesse semestre 5 alunos em média além da técnica responsável e a coordenadora.

A caixa seca (dry-box) é um equipamento para manipular e armazenar produtos químicos sensíveis ao ar. Sua utilização vem sendo feita exclusivamente pelo alunos grupo (10% do tempo em manipulação) e se encontra atualmente na sua capacidade máxima de armazenamento.

A capela química é utilizada para armazenamento de produtos (capacidade máxima atingida), síntese de nanopartículas (50% do tempo utilizada com alunos) e preparação de amostras para microscopia eletrônica (2% de utilização pelos usuários do LME).

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

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

Finalmente, o Laboratório de Microfabricação (LMF) operou como laboratório aberto e de apoio. O primeiro semestre de 2003 foi marcado pelo grande número de usuários. Ao contrário das propostas submetidas aos outros laboratórios do LNLS, os projetos submetidos ao LMF ficam “abertos” por um período de 1 ano após a aceitação do mesmo. Devido a este fato, o usuário pode realizar muitas visitas de trabalho ao LMF, fato este que ocorre com a maioria dos projetos até então aprovados.

Além dos projetos que são submetidos via internet/SAU, o LMF também atende a usuários internos e externos, que necessitam de infraestrutura laboratorial para desenvolvimento/aperfeiçoamento dos respectivos projetos. Em geral estes usuários utilizam parte dos equipamentos do LMF, ou realizam trabalhos de curta duração, que não justificam a abertura de um projeto formal, atuando na forma de laboratório de apoio.

O tempo de uso do LMF esteve dividido entre os usuários internos (grupos do LNLS), usuários externos para pequenos trabalhos (grupos da UNICAMP e GENPRA), manutenção, melhoramentos, caracterização de novos processos e, com a maior parte do tempo, para a realização dos projetos externos, conforme demonstrado no Gráfico 7.

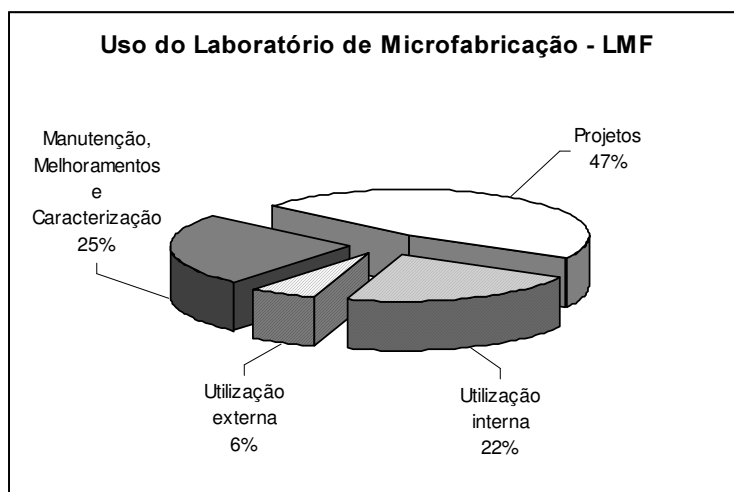


Gráfico 7: Utilização do Laboratório de Microfabricação

Neste período o Laboratório de Microfabricação foi utilizado por mais de 20 usuários (entre coordenadores e estudantes), apenas nos projetos registrados, muitos destes com mais de 3 visitas de trabalho.

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

Atualmente, além dos 7 projetos submetidos no 2º semestre de 2002, que ainda estão em operação, mais 6 projetos (4 já aprovados e 2 aguardando parecer do assessor) foram submetidos e outros 3 estão em fase de discussão para futura submissão. No 2º semestre de 2003, com a provável entrada em operação do laboratório de filmes finos, que colocará a disposição da comunidade um novo conjunto de técnicas de processamento, o número de projetos tenderá a crescer.

3. P.D & I EM Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia

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

Este Programa é desenvolvido principalmente no Centro de Biologia Molecular Estrutural (CEBIME) além das linhas de luz dedicadas. Os laboratórios que compõem o CEBIME foram mantidos em funcionamento de forma satisfatória. Além da pesquisa interna e da cooperação com pesquisadores externos, o CEBIME é o centro coordenador da Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo e da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural, neste caso juntamente com o Centro Nacional de Ressonância Magnética Nuclear (CNRMN) da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Foi iniciado em 2003 o funcionamento do Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, como laboratório aberto a usuários externos, sendo os projetos selecionados e o tempo distribuído conforme o mérito, por um comitê externo, após exame por assessores *ad hoc*.

A implantação do Laboratório de Espectrometria de Massa, com apoio da FAPESP, foi concluída neste semestre. Este laboratório conta com dois espectrômetros de massa. Um deles, denominado “Q-tof Ultima” (Waters-Micromass) é um aparelho integrado de cromatografia líquida-espectrometria de massa, baseado em ionização por “*electrospray*”. O segundo aparelho, 4700 Proteomics Analyzer (Applied Biosystems), é baseado na ionização por MALDI (*Matrix Assisted Laser Desorption Ionization*). Ambos permitem o sequenciamento de proteínas “*ab initio*” podendo ser utilizados, tanto para caracterização de proteínas isoladas como para caracterização do *proteoma* de microrganismos ou de tecidos ou órgãos de organismos multicelulares.

O Projeto Proteoma ainda depende de definição da FAPESP quanto a sua forma de financiamento. Atualmente, está previsto a assinatura de um convênio entre o MCT e a FAPESP visando combinar esforços neste Projeto. Dando início aos trabalhos da Rede Nacional de Proteoma, estão programados para o segundo semestre de 2003 dois cursos de espectrometria de massa.

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, de laboratório aberto a pesquisadores que realizarão seus experimentos de forma independente nas instalações do CEBIME e na forma de colaborações.

3.2.1 - Redes

A Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo (SMolBNet) está em andamento desde 2001, sendo que pesquisadores dos laboratórios desta rede recebem auxílio e realizam experimentos continuamente no CEBIME. O período que cada pesquisador da Rede passa no CEBIME, assim como as atividades que desenvolvem são variáveis e estão resumidos na Tabela 8. Um total de 35 pesquisadores ligados a Rede SmolBNet receberam auxílios para realizar as seguintes atividades: clonagem, expressão e purificação de seis proteínas, sequenciamento de 400 amostras de DNA e caracterização de 12 proteínas por espectroscopia. Além disso, 20 proteínas estão em fase de cristalização, sendo que 10 já foram cristalizadas e dados de difração de raio-X de 6 delas já foram coletados. Cinco proteínas estão sendo resolvidas pela técnica de Ressonância Magnética Nuclear, sendo o tempo de coleta de dados para estas proteínas foi de 2136 horas (os aparelhos de RMN funcionam 24h/dia). Para cada uma das proteínas que estão sendo resolvidas por RMN tem um estudante sendo treinado e o tempo de permanência destes varia de 45 dias a 6 meses.

Coordenador do Grupo	Instituição	Tipo de apoio
Clonagem, Expressão, Purificação e Espectroscopia		
Luiz Carlos de S. Ferreira	USP	Expressão, Purificação, CD
Emer S. Ferro	USP	Expressão no sistema de baculo vírus
Maria C. Bertolini	UNESP	CD; DSC
Anete P. Souza e Tomaso Yano	UNICAMP	Sequenciamento de DNA
Shaker C. Farah	USP	CD
Íscia Lopes Cendes	UNICAMP	Clonagem, expressão, purificação, CD e cristalização
Ismael G. da Silva	UNIFESP - EPM	Expressão, purificação, CD e cristalização

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

Cristalografia		
Luís C. de S. Netto	USP	Cristalização e coleta de dados na linha CPR
Hamza El Dorry	USP	Cristalização
Emer S. Ferro	USP	Cristalização
Carla C. Oliveira	USP	Reunião, cristalização, CD
Walter F. Junior	UNESP	Cristalização
Anete P. Souza, Tomaso Yano	UNICAMP	Reuniões, CD, DLS, Purificação, Cristalização, coleta dados de difração
Sandro R. Valentini	UNESP	Cristalização
Sergio Schenkman	UNIFESP	Cristalização
Shaker C. Farah	USP	Cristalização e coleta de dados
Luis C. de S. Ferreira	USP	Cristalização
Ressonância Magnética Nuclear		
Shaker C. Farah	USP	RMN coleta/análise CD coleta
Anete P. de Souza	UNICAMP	RMN coleta CD coleta
Ronaldo de C. Araújo	UNIFESP	RMN coleta/análise
Sergio Schenkman	UNIFESP	RMN coleta/análise

Tabela 8: Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede de Biologia Molecular Estrutural do estado de São Paulo.

No primeiro semestre de 2003 iniciou-se as atividades da **Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural**, tendo sido realizada uma reunião com representantes dos grupos participantes no dia 9 de Junho, além de ter sido oferecido um curso de cristalografia de proteínas de 10 a 12 de Junho para 21 participantes da Rede Nacional. Os trabalhos da Rede Nacional já estão em andamento (ver Tabela 9) e o CEBIME está dando apoio para clonagem e expressão (quatro grupos) e para cristalografia (1 grupo).

Coordenador do grupo	Instituição	Tipo de apoio
Jorge Lulek	Univ. Est. Ponta Grossa – PR	Apoio clonagem e expressão
Lucimara Fassarella Agnéz Lima	UFRGN	Apoio uso de sistema baculovirus
Debora Foguel	UFRJ	Clonagem
Marcelo Santoro	UFMG	Clonagem
Sonia Maria de Freitas	UNB	Cristalização e coleta de dados

Tabela 9: Resumo das atividades de apoio a pesquisadores ligados à Rede Nacional de Molecular Estrutural.

3.2.2 - Laboratório “aberto” com tempo concedido por mérito dos projetos

A partir de Maio de 2003 o Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) passou a funcionar como laboratório aberto para uso independente por pesquisadores externos por tempo determinado. Para distribuição do tempo de uso dos aparelhos, os projetos são recebidos em três chamadas anuais e avaliados por um comitê formado por três pesquisadores externos, auxiliados pelo coordenador do Laboratório de RMN. Na primeira reunião do comitê de seleção em 2003 foram avaliados 8 projetos dentre os quais 4 foram considerados adequados para realização no CEBIME. O tempo de coleta de dados de RMN é relativamente longo, por isso este número de projetos selecionados é significativo. Neste primeiro semestre um pesquisador utilizou o aparelho de 500 MHz por 165 horas em Maio de 2003. Uma nova avaliação de projetos está prevista para o segundo semestre de 2003.

Para cálculo do tempo de uso do aparelhos de ressonância magnética nuclear são consideradas 24 horas por dia, já que em geral as coletas são feitas em período contínuo por vários dias. Os Gráficos 8 e 9 contém o resumo da distribuição do tempo dos 2 aparelhos, sendo que a maior parte foi dividida entre projetos da Rede SMOLBNET, projetos em colaboração e projetos da pesquisa do grupo de RMN.

3.2.3 - Colaboração

Projetos de pesquisadores de outras instituições, nacionais e internacionais de duração mais longa e que envolvam um volume significativo de tempo e recursos dos pesquisadores do CEBIME são realizados em colaboração. No momento existem 16 projetos em colaboração em andamento, sendo 8 em ressonância magnética nuclear, 3 em cristalografia de proteínas, 3 em expressão e análise espectroscópica de proteínas e 2 em clonagem, expressão e caracterização funcional de proteínas.

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

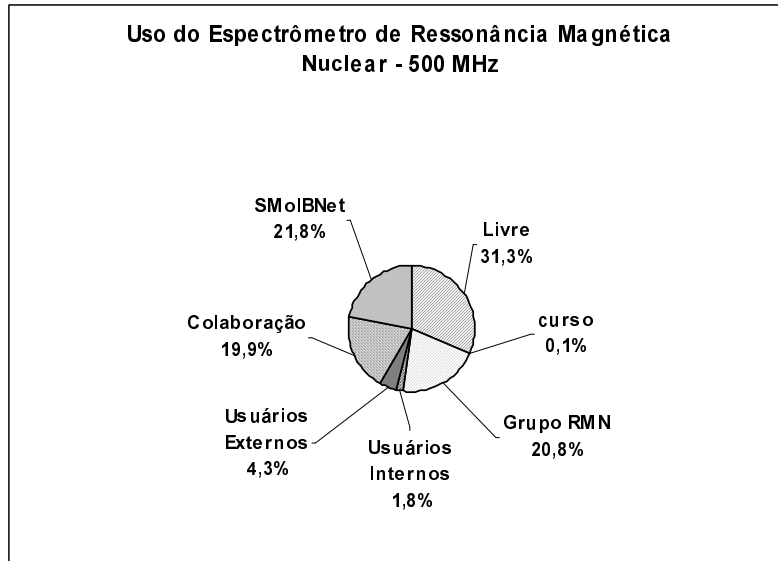


Gráfico 8: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear 500 MHz (para o cálculo são consideradas 24 horas por dia, o tempo livre corresponde principalmente a feriado finais de semana e períodos noturnos)

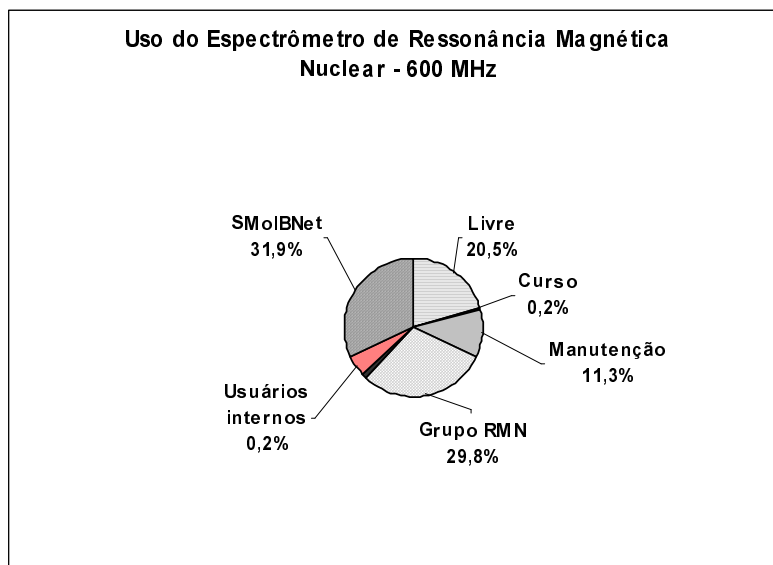


Gráfico 9: Resumo do tempo de uso do aparelho de Ressonância Magnética Nuclear MHz (para o cálculo são consideradas 24 horas por dia, o tempo livre corresponde principalmente a feriados finais de semana e períodos noturnos).

3.3. Pesquisa Realizada por membros do CEBIME em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia

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

4. P D & I em Aceleradores

4.1 - Melhoramentos no Anel de Armazenamento

Duplicação do sistema de RF do anel de armazenamento.

Esta duplicação, iniciada ainda em 2002 é necessária em função das novas demandas sobre o sistema atual, oriundas da operação em maiores correntes e da futura instalação de dispositivos de inserção. No primeiro semestre de 2003, foram instaladas alterações do sistema de vácuo, no trecho 5 do anel de armazenamento, visando a instalação, até o final de 2003, de uma nova cavidade de RF. Foram também fechados os projetos da rede de distribuição de alta potência e dos circuitos de controle em baixa potência assim como da estação de controle de temperatura. Todos os componentes foram especificados e comprados e aproximadamente 60% destes já estão no laboratório. A montagem dos vários subsistemas já foi iniciada e uma estação de testes deve entrar em operação em setembro, permitindo validar os conceitos antes de sua instalação definitiva no anel de armazenamento, prevista para novembro de 2003.

Novos Kickers para o anel de armazenamento

Prosseguiram os testes com câmaras cerâmicas, mas ainda não tivemos êxito no processo de brasagem metal-cerâmica. Os problemas encontrados estão associados à resistência mecânica da junção quando solicitada pelos esforços a que a peça é submetida sob vácuo. O trabalho de prototipagem continua e novos testes serão feitos em agosto com a chegada de novos materiais, já encomendados.

Melhoramentos na Blindagem da Fonte de Luz Síncrotron

Seguindo as recomendações do Comitê Técnico-Científico, ainda em 2002 foram realizados cálculos e feito o detalhamento mecânico para uma nova parede de blindagem para a fonte de luz síncrotron, objetivando permitir a permanência dos usuários no Hall experimental mesmo durante o processo de injeção. No primeiro semestre de 2003, foi concluído o teto do síncrotron injetor e novas medidas estão em andamento para definir o prosseguimento dos trabalhos.

Estudos de Dipolos de Alto Campo

Concluído o projeto de uma fonte de 500 A, que poderia alimentar os eletroímãs dipolares atuais do anel de armazenamerto, elevando a energia do feixe de elétrons para 1,6 GeV.

Nova rede de controle

Instalada para testes uma nova rede de comunicação serial para os controladores locais dos equipamentos que compõe a fonte de luz síncrotron. A nova topologia deverá se mostrar mais confiável e insensível a variações de temperatura ambiente que o modelo antigo.

Diagnóstico de Feixe

Implementado o modo de operação *single-bunch* com a construção de um eliminador de pacotes indesejados e um medidor de corrente por pacote.

Iniciados os contatos comerciais e técnicos com potenciais fornecedores de monitores de posição do feixe de luz (utilizando raios X), seguindo a recomendação de priorização do Comitê Técnico-Científico.

4.2 - Dispositivos de Inserção

Acompanhamento da construção por fornecedor externo, (STI Optronics) de um wiggler multipolar híbrido de 2,0 T, a ser instalado no primeiro semestre de 2004. A construção do dispositivo segue dentro do previsto. Foram construídos também os primeiros protótipos da câmara de vácuo do wiggler que, por razões de custo, decidimos fazer no LNLS. Foi projetado ainda o suporte desta câmara e acertado os detalhes de uma colaboração com o laboratório ESRF em Grenoble para realização do serviço de deposição de uma película adsorvedora de gases (NEG – *getter* não evaporável) que proverá o bombeamento de vácuo nesta câmara longa e de baixa condutância.

Prosseguem também os trabalhos de construção de uma bancada de testes e caracterização magnética para dispositivos de inserção. Esta bancada será usada tanto para verificação das medidas do wiggler multipolar como para caracterizar e fazer ajustes finos no dispositivo ondulator em construção no LNLS.

5. Transferência de Tecnologia

Durante o primeiro semestre de 2003 foram realizadas diversas interações com a indústria e outros institutos de pesquisa. Estas interações podem ser classificadas em dois tipos: desenvolvimento de projetos e serviços.

Entre os serviços destaca-se a parceria com o Laboratório Societé Synchrotron Soleil da França, por meio de acordo de colaboração técnico científico, para desenvolvimento, fabricação, montagem e ensaios de caracterização em sistemas de radiofrequência, utilizando uma concepção inovadora a partir de componentes de estado sólido. Este trabalho visa a fabricação de módulos de potência que poderão substituir as válvulas klystron, geradoras de microondas, essenciais para o funcionamento dos aceleradores de partículas. O valor deste primeiro lote de componentes, exportado em fevereiro de 2003, foi de U\$6,000.00. Um segundo lote de componentes, em escala muito maior, está sendo estudado para o próximo ano, resultado do excelente desempenho das peças do lote inicial.

Dando prosseguimento ao desenvolvimento do Projeto de Cooperação Científica com a Indústria Guanabara Química Industrial SA - GETEC. A primeira etapa do projeto de colaboração GETEC-LNLS consistiu na caracterização do catalisador Ni-Raney em diferentes estágios de atividade catalítica. Para tanto, foram realizadas medidas de Espectroscopia de Absorção de Raios-x (XAS), Difração de Raios-x (XRD), Fluorescência de Raios-x (XRF) e Microscopia Eletrônica de Varredura (SEM). Devido à alta reatividade e atividade pirofórica deste material, condições apropriadas de acondicionamento de amostra foram desenvolvidos para cada técnica de caracterização. Os resultados obtidos foram apresentados na *XII Conference X-ray Absorption Fine Structure* (22-27 de Junho, Malmo, Suécia) e apresentam dados inovadores, uma vez que contradizem o atual mecanismo proposto para o fenômeno da perda de atividade catalítica deste material. A segunda etapa deste estudo, envolve a elaboração de melhorias no processo de obtenção do catalisador. Esta etapa está em fase inicial, onde estão sendo construídos os equipamentos necessários para a reprodução das condições de produção do catalisador, como forno, reator de digestão e hidrogenação.

Neste primeiro semestre teve início a segunda etapa do convênio HP-Brasil - ABTLuS. O objetivo geral deste convênio é estudar a viabilidade do uso dos chamados

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

"pontos quânticos semicondutores auto-formados", como implementações de "bits-quânticos" para processamento e armazenamento de informação quântica. Na primeira etapa deste projeto, durante o segundo semestre de 2002, foram projetadas uma fonte de evaporação para a construção (crescimento) dos pontos quânticos e feitos estudos teóricos na cinética de crescimento dos "pontos quânticos" no mapeamento das principais características químicas e estruturais que determinam a eficiência do armazenamento da informação quântica. Neste semestre, com a participação de um aluno de iniciação científica, foi projetada e testada uma cavidade eletromagnética ressonante onde os pontos quânticos estarão inseridos para a manipulação e leitura de informação quântica - uma das peças fundamentais do "hardware de computação quântica". Além disso foi dado prosseguimento aos estudos teóricos, com enfoque na dinâmica dos "bits-quânticos" na cavidade ressonante. Ainda neste semestre, foram defendidas duas teses de mestrado como resultado dos trabalhos realizados neste convênio.

Ainda no desenvolvimento de projetos foi iniciado estudos com a Empresa Produtos de Alto Desafio Tecnológico de Campinas – Padtec para elaboração e desenvolvimento de metalização sobre cerâmicas para aplicação em telecomunicações. Outras duas empresas (Zurick e Optolink) tem mantido contatos com o Laboratório de Microfabricação.

Além dos serviços e desenvolvimento de projetos, destaca-se a interação com o Instituto de Química da Universidade Federal da Bahia para a construção de câmara de amostras, onde será acoplada válvulas geradoras de pulso ultra-sônicos. Essa interação encontram-se em nível de detalhamento.

6. INFORMAÇÃO, EDUCAÇÃO E DIVULGAÇÃO

6.1. Informação Científica e Administrativa

Os serviços oferecidos pela biblioteca prosseguiram regularmente. Um dos maiores destaques para este semestre foi a realização de um acordo entre o MCT e a CAPES que disponibilizou o Portal da CAPES para as unidades de Pesquisa do MCT, beneficiando também o LNLS.

Informática e Internet

No primeiro semestre de 2003 foi finalizado o sistema de gerenciamento de eventos e cursos no LNLS, com controle das inscrições pela *home-page* e permissão de submissão para os usuários dos resumos e pedidos de auxílio financeiro. Para otimizar o recebimento de propostas de pesquisa, recebidas por meio da página do LNLS, foi desenvolvido sistema para gerenciamento e controle das etapas de avaliação até a realização e obtenção de resultados.

Na área de segurança da rede de informática do LNLS, as principais medidas implementadas neste semestre foram: 1) o uso de certificados digitais de uso livre com criptografia de 128 bits, 2) sistema de rede de perímetro ou DMZ (De-Militarized Zone), 3) um sistema para detecção de intrusão indevida na rede de dados (IDs - Intrusion Detect System) e 4) sistema de sincronização com servidores públicos de relógio de precisão (NTP - Network Tim Protocol).

6.2. Educação e Produção Científica

Com relação a produção técnico científica, foram registrados no banco de dados 51 artigos publicados em periódicos indexados, no primeiro semestre de 2003, provenientes do uso das instalações do LNLS. Esses dados ainda são parciais, pois a atualização ocorre anualmente por questões operacionais.

A Tabela 10 relaciona os pesquisadores da ABTLuS em atividade durante o primeiro semestre de 2003.

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

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

Tabela 10 : Pesquisadores da ABTLuS

Cumpra esclarecer que, para fins de acompanhamento dos indicadores de desempenho pactuados no Contrato de Gestão, serão considerados um total de 21,5 pesquisadores (os pesquisadores associados são considerados na regra de 1/2 pesquisador).

Durante o primeiro semestre de 2003, um total de 63 alunos estiveram sob a orientação dos pesquisadores da ABTLuS, sendo 18 alunos de iniciação científica, 9 projetos de bolsas técnicas, 36 alunos de pós-graduação. Foram supervisionados 14 pós-doutores durante o período.

A Tabela 11 relaciona os alunos de pós-graduação sob orientação durante o primeiro semestre de 2003.

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

Quant.	Pós-graduandos	Nível	Observações
1	Amanda Abdlla Valério	Doutorado	
2	Anita P. Testa Salmazo	Mestrado	
3	Celisa Caldana Costa	Mestrado	
4	Cynthia Piamonteze	Doutorado	
5	Cristiano L.P. de Oliveira	Doutorado	
6	Dario O. dos Passos	Doutorado	
7	Edmilson Rui	Doutorado	
8	Eurípedes de A. R. Junior	Doutorado	
9	Fabio Cupri Rinaldi	Mestrado	
10	Félix G. G. Hernandez	Mestrado	
11	Flávia Cristina Nery	Doutorado	
12	Flávia Raquel G. Carneiro	Doutorado	
13	Jose Marcelo Vargas	Doutorado	
14	Júlio Cesar Borges	Doutorado	
15	Júlio Criginski Cezar	Doutorado	Término: jun/2003
16	Kelly Santos	Doutorado	Início: mar/2003
17	Leornado F. Fraceto	Doutorado	
18	Leticia Khater	Doutorado	
19	Lucia Helena Coutinho	Doutorado	
20	Marcela Hernades Gonzales	Mestrado	
21	Marcelo Jun Murai	Mestrado	
22	Marina M. Araujo Teixeira	Doutorado	Início: mai/2003
23	Marina Soares Leite	Mestrado	
24	Maya Paola C. Vergara	Mestrado	
25	Narcizo M. de S. Neto	Mestrado	
26	Natalia Prado de Abreu	Doutorado	
27	Patrícia R. de Moura	Doutorado	
28	Raimundo L. Serrano	Doutorado	
29	Ricardo dos R T. Marinho	Doutorado	Término: jun/2003
30	Ronaldo A. Pinto Nagem	Doutorado	
31	Rosicler Lazaro Barbosa	Doutorado	
32	Sandra M. N.Scapin	Doutorado	
33	Sebastian Klinke	Doutorado	Início: mai/2003
34	Taila A. Lemos	Doutorado	Término: jun/2003
35	Tulio C. R. da Rocha	Doutorado	
36	Willian C. B. Regis	Doutorado	

Tabela 11: Alunos de pós-graduação sob orientação

A taxa de orientação de pós-graduandos foi de 1,7 aluno por pesquisador da ABTLuS.

A Tabela 12 relaciona os pós-doutores sob supervisão durante o primeiro semestre de 2003.

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

Quant.	Pós-doutores	Observações
1	Ariel Gomez Gonzales	Término: jan/2003
2	Evaldo Ribeiro	
3	Gustavo de M. Azevedo	
4	Juan C. G. Vargas	
5	Ljubica Tasic	
6	Manoel G.P. Homem	Início: fev/2003
7	Marcelo José Surpili	Início: fev/2003
8	Maria Cristina Cabral Garcia	
9	Maurício Luiz Sforça	
10	Sérgio Oyama Junior	Término:abr/2003
11	Silvana Navarro Cassu	
12	Thelma de Aguiar Pertinez	Término:mar/2003
13	Varlei Rodrigues	
14	Wladimir Hernandez Flores	Término: jun/2003

Tabela 12: Pós-doutores sob supervisão

A taxa de supervisão de pós-doutores durante o primeiro semestre de 2003 foi de 0,7 pós-doutor por pesquisador interno. O número de pós-doutores continua abaixo do desejado. Vale ressaltar que este é um cenário característico em diversas instituições, não só no LNLS.

Neste primeiro semestre de 2003 foi realizado um curso e um mini-curso detalhados na Tabela 13. A baixa oferta de cursos neste primeiro semestre deve-se a vários fatores: 1) não foi realizado nenhuma Oficina da Rede de Nano por considerar-se concluída esta etapa; 2) apenas um curso da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural foi realizada devido às restrições orçamentárias realizadas pelo Ministério de Ciência e Tecnologia - MCT para esta atividade.

Título	Palestrantes/organizador	Período	Participantes
Mini-curso: "Estabilidade de proteínas: Teoria e Prática"	Carlos Ramos	02 a 06 de junho	22
Curso: Cristalização	Francisco J. Medrano Martins	10 a 12 de junho	20

Tabela 13: Cursos realizados no primeiro semestre de 2003

É importante ressaltar que, no primeiro semestre de 2003, o LNLS em parceria com a UNICAMP, promoveu o curso eletivo denominado "Introdução às Técnicas Experimentais no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron" para 22 alunos de graduação dos cursos de Física, Química e Biologia da UNICAMP. O caráter multidisciplinar do curso possibilitou

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

aos alunos compreensão básica das técnicas disponíveis no LNLS, bem como participar de experiências associadas a diferentes áreas do conhecimento.

Nesse primeiro semestre foi realizado a VI Oficina de Física: Física Aplicada à Biologia e Medicina, a 1ª edição, realizada no dia 12 de abril: contou com a participação de 110 integrantes; a 2ª edição, realizada no dia 24 de maio: teve 80 participantes (2ª edição foi organizada em virtude da alta demanda observada na 1ª edição).

Essas oficinas são abertas ao público em geral mas voltadas principalmente a professores do ensino médio, com o objetivo de atualizá-los quanto à pesquisa que se desenvolve nas universidades e centros de pesquisa.

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

6.3. Divulgação

Os maiores destaques na área de divulgação neste semestre foram a produção do folder "Oportunidades no LNLS", com 5 mil exemplares, já esgotados, em fase de reedição e impressão de mais 5 mil exemplares, a publicação da 7ª edição da Newsletter e a realização da *XIII Reunião Anual de Usuários*, nos dias 17 e 18 de fevereiro que contou com a participação de 303 usuários.

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

7. GESTÃO E PLANEJAMENTO

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

A infra-estrutura geral do campus foi mantida operacional durante o primeiro semestre de 2003. O alojamento, localizado no campus do LNLS, recebeu um total de 464 hóspedes, foram servidas aproximadamente 28 mil refeições e mais de 729 atendimentos de usuários no período.

Foram realizados 41 seminários, sendo 7 por pesquisadores estrangeiros e 34 por pesquisadores brasileiros e estiveram no LNLS 488 visitantes, oriundos de colégios, universidades, eventos científicos e autoridades. Dentre as autoridades que visitaram o LNLS, destacamos a presença do Excelentíssimo Dr. Ministro de Ciência de Tecnologia – MCT e do Comitê Técnico Científico do LNLS, por ocasião da abertura da XIII Reunião Anual dos Usuários.

7.1. Relatório Financeiro

Contratualmente, no primeiro semestre de 2003, o repasse previsto no Oitavo Termo Aditivo foi cumprido em sua integridade. No entanto, o orçamento pactuado por meio do 8ª Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, não contempla a totalidade dos recursos orçamentários aprovados pelo Congresso para o exercício vigente, conforme pode-se observar na Tabela 14.

Orçamento da ABTLuS	Aprovado Congresso	Contratado (8ª Termo Aditivo)
	2003	
Fonte Luz Síncrotron	R\$ 14.356	R\$ 13.000
Biologia Molecular Estrutural	R\$ 4.250	R\$ 2.628
TOTAL	R\$ 18.606	R\$ 15.628

Tabela 14: Orçamento da ABTLuS.

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

O orçamento da ABTLuS pactuado no 8º Termo Aditivo do Contrato de Gestão para o período foi de R\$ 15,6 milhões. A evolução pode ser observada no Gráfico 10.

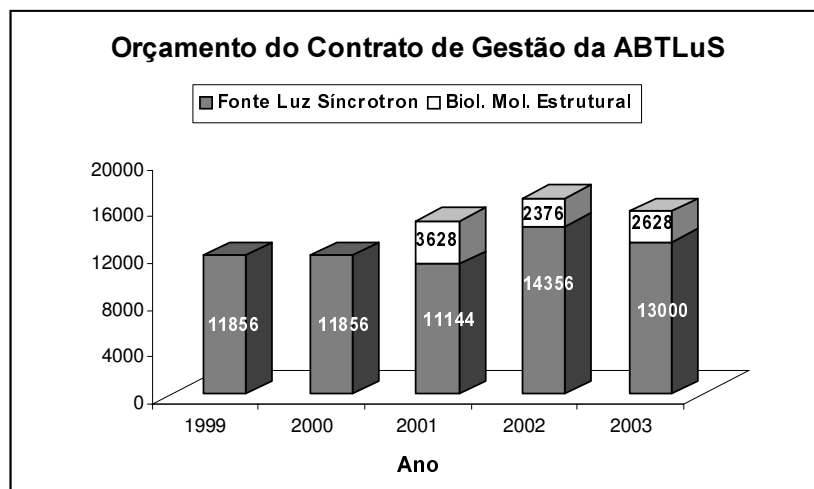


Gráfico 10: Orçamento do Contrato de Gestão ABTLuS.

O fluxo de repasses dos recursos do Contrato de Gestão não foram regulares no período, entretanto foi cumprida em sua totalidade o cronograma de desembolso previsto, como podemos verificar no Gráfico 11.

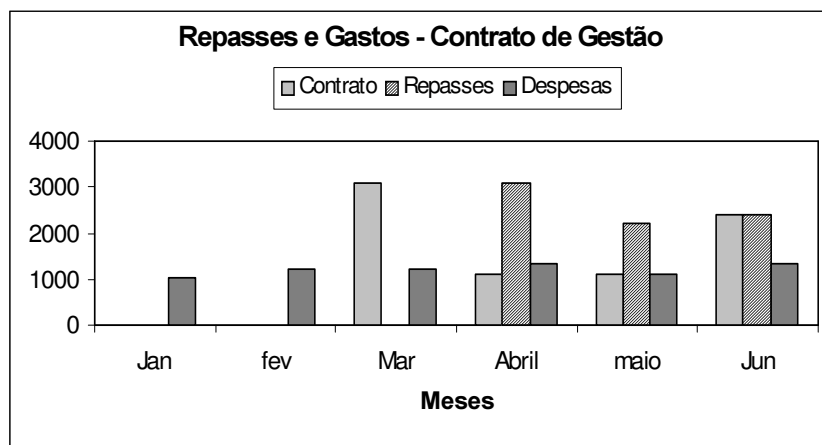


Gráfico 11: Repasses e gastos do primeiro semestre de 2003.

As fontes de receitas da ABTLuS, durante o primeiro semestre de 2003, foram principalmente recursos do Contrato de Gestão, recursos de Agências de Fomento e receitas próprias provenientes de vendas de serviços e resultado de aplicações financeiras descritas na Tabela 15.

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

Descrição	R\$ 1.000	%
Recursos totais durante 1º semestre de 2003	R\$ 11.701	
Recursos do Contrato de Gestão	R\$ 7.714	66%
Repasses Contrato de Gestão - FLS	R\$ 6.400	
Repasses do Contrato de Gestão - CEBIME	R\$ 1.314	
Outras Receitas	R\$ 3.987	34%
Vendas, receitas financeiras e outras	R\$ 1.358	
Bolsas e Pessoal CNPq	R\$ 943	
Agências de Fomento	R\$ 1.686	

Tabela 15: Recursos Totais ABTLuS.

Cumprir observar que os recursos provenientes das Agências de Fomento não referem-se à doação do equipamento à ABTLuS ou sua incorporação ao patrimônio da mesma, aqui refere-se à entrada do equipamento na ABTLuS.

A alavancagem de recursos do contrato de gestão, durante o primeiro semestre de 2003 foi de 52% conforme descrito no indicador de desempenho. Os gastos com pessoal durante o período totalizaram R\$ 4.328 milhões, ou seja, 37% dos recursos totais do período.

Comentário:

O balanço patrimonial, a demonstração do superávit da ABTLuS, o parecer dos auditores independentes, a demonstração das origens e aplicações de recursos, a demonstração do fluxo de caixa e as notas explicativas constam no apêndice E.2 desse relatório.

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

C. INDICADORES DE DESEMPENHO

Macro-Objetivo	Indicador	Unid.	Tipo	Peso	Acumulado 1º Sem/03	Pactuado 2003
Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.	1. Número de horas-linha	U	D	2	19.490	33.000
	2. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)	%	D	3	98%	93%
	3. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron	%	D	3	99%	90%
	4. Custo hora-linha	R\$	D	2	R\$ 232	< R\$ 300
	5. Custo hora-microscópio	R\$	D	2	R\$ 512	< R\$ 550
	6. Número de projetos realizados	U	Uso	3	245	300
	7. Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron	%	Uso	2	74%	60%
	8. Índice de satisfação dos usuários	%	D/Uso	2	95%	85%
	9. Número total de publicações	U	Uso	3	51	100
Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo.	10. Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS	%	D	2	1,2	2,5
	11. Taxa de orientação de pós-graduados	%	D	2	1,7	1,5
	12. Taxa de supervisão de pós-doutores	%	D	3	0,7	1,0
	13. Número de notas técnicas disponibilizadas na Internet	U	D	2	3	10
Implantar e gerir a infra-estrutura da ABTLuS visando ganhos de eficiência e eficácia mediante novos mecanismos de gestão e informação e difusão de Ciência, Tecnologia e Inovação.	14. Número de estudos e projetos externos	U	D	2	3	5
	15. Número de técnicos externos treinados	U	D	2	22	25
	16. Número de pesquisadores externos treinados	U	D	3	42	250
	17. Horas de treinamento por funcionário	U	D	1	7	17
	18. Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão	%	D	1	52%	30%

Tabela16: Quadro dos Indicadores.

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

As análises dos resultados apresentados no quadro de indicadores, Tabela 16, realizados no período de janeiro a junho de 2003, estão descritas a seguir:

1 – Números de horas linhas

Previsto: 33.000 horas linhas

Realizado: 19.490 horas linhas

Durante o primeiro semestre de 2003 foram fornecidas 2082 horas de feixe para usuários de luz síncrotron em 10 linhas de luz. Esse número de horas fornecidas só foi possível em função da fonte de luz síncrotron ter operado em regime contínuo (24 horas por dia de segunda a sexta-feira).

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

A composição da quantidade de horas fornecidas pelas 10 linhas no 1º semestre de 2003 deu-se da seguinte forma:

Período	Horas de operação	Linhas em operação	Total de horas disponíveis
Janeiro	398	10	3980
Fevereiro	339	10	3390
Março	187	10	1870
Abril	452	10	4520
Maio	392	10	3920
Junho	124	10	1240
Horas no Modo Multi Bunch		10	18920
Março	190	3	570
Horas no Modo Single Bunch		3	570
Total de horas disponíveis		10	19490

A meta pactuada para o ano deve ser atingida dado o desempenho do primeiro semestre de 2003 e a continuidade do regime contínuo de operação.

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

2. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)

Previsto: 93%

Realizado: 98%

No primeiro semestre de 2003 foram fornecidas 2082 horas de feixe para usuários de luz síncrotron, sendo 2006 horas durante o horário programado (horas entregues) e 76 horas em turnos extraordinários. Foram programadas 2051 horas para este semestre.

A tendência é de que se mantenha o nível de confiabilidade com que a fonte de luz vem operando, superando a meta pactuada.

3 – Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron

Previsto: 90%

Realizado: 99%

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

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

Fórmula:

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

Memória de Cálculo:

Parâmetro Operacional	Desempenho (1o. semestre 2003)	Valor Nominal	Peso
Corrente Inicial Média	250 mA	250	3
Corrente Média	155 mA	163	5
Tempo de Vida Médio	11.3 h	10	1

Ind. 3 = $\{[(250/250)^*3] + [(155/163)^*5] + [(11,3/10)^*1]\} / 3+1+5 = 99\%$

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

A tendência é de que se mantenha o nível de desempenho com que a fonte de luz vem operando, superando a meta pactuada.

4 – Custo hora-linha

Previsto: < R\$ 300 hora linha

Realizado: R\$ 232 hora linha

A fórmula de cálculo do custo hora-linha foi revista para o quadro de indicadores de 2002 com a Comissão de Avaliação e Acompanhamento do Contrato de Gestão e foram considerados os gastos de manutenção da infra-estrutura de pesquisa com luz síncrotron (energia elétrica, pessoal, etc), excluídos os investimentos.

Fórmula:

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

Memória de Cálculo:

Descrição	Valores em R\$
Gastos com manutenção e melhoramentos dos programas 1 e 4	R\$ 2.457.141
60% dos gastos com demais programas de infra-estrutura comum	R\$ 2.058.882
Total dos gastos	R\$4.516.022
Número de horas-linhas no ano	19.490 h
Custo Hora linha no ano	R\$ 231,71h

Ind. 4 = $[R\$2.457.141 + (R\$3.431.469 * 60\%)] / (14.490) = R\$ 232,00$

Durante o primeiro semestre de 2003 houve aumento no número de horas-linhas entregues (turnos estendidos) fato que reflete no valor do custo-hora linha. A expectativa é de alcance da meta, não superando o custo hora-linha pactuado.

5 – Custo hora-microscópio

Previsto: < R\$ 550 hora microscopia

Realizado: R\$ 512 hora microscopia

Da mesma forma que no custo hora-linha, a fórmula de cálculo do custo hora-microscópio foi revista para o quadro de indicadores de 2002, com a Comissão de Avaliação e Acompanhamento do Contrato de Gestão e foram considerados os

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

gastos com manutenção da infra-estrutura de pesquisa com os microscópios (contrato de manutenção dos microscópios, energia elétrica, pessoal, etc) e excluídos os investimentos.

Fórmula:

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

Descrição	Valores em R\$
Gastos com manutenção e melhoramentos do programa 2	R\$ 553.003
15% dos gastos com demais programas de infra-estrutura comum	R\$ 514.720
Total dos gastos	R\$ 1.067.723
Horas de microscópios	
- LV	710 h
- TEM	957 h
- FEG	420 h
Total de horas de microscópios	2087 h
Custo hora-microscópios	R\$ 512,00

$$\text{Ind. 5} = [\text{R}\$553.003 + (\text{R}\$ 3.431,469 * 15\%)] / (710 + 957 + 420) = \text{R}\$ 512,00$$

Durante o primeiro semestre de 2003 foram realizadas 2087 horas de microscópios. A expectativa é de alcance da meta pactuada.

6 – Números de projetos realizados

Previsto: 300 propostas de pesquisas

Realizado: 245 propostas de pesquisas

No primeiro semestre de 2003 foram realizados 171 propostas de pesquisas nas linhas de luz e 73 no laboratório de microscopia eletrônica e 1 no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear. Para o segundo semestre de 2003, com a parada programada para os meses de novembro e dezembro, a tendência é de redução do número de propostas realizadas. Esta parada estava prevista e não deverá prejudicar o cumprimento da meta pactuada.

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

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

Previsto: 60%

Realizado: 74%

O indicador considera a capacidade de ampliação do tempo de operação da fonte de luz síncrotron. Do total de 4.344 horas disponíveis no período, a fonte de luz síncrotron não esteve em operação durante 1.132 horas.

Fórmula:

Coefficiente do total de horas em uso e horas disponíveis no período.

Memorial de Cálculo:

Uso da Fonte de Luz Síncrotron	Total Horas
Usuários	2082 h
Injeção	105 h
Estudo de Máquina	461 h
Manutenção	244 h
Comissionamento	275 h
Falhas	45 h
Total em uso	3212 h
Horas disponíveis no semestre	4.344 h
Grau de Saturação	74%

$$\text{Ind 7} = (2082 + 105 + 461 + 244 + 275 + 45) / (181 \text{ d} * 24 \text{ h}) = 74\%$$

O aumento do índice de saturação da fonte em relação ao valor do ano de 2002 é resultado do aumento da demanda pelo tempo de feixe por parte dos usuários o que levou a operação de 24horas/dia. A tendência é superar a meta pactuada.

8 – Índice de satisfação dos usuários

Previsto: 85%

Realizado: 95%

O indicador é elaborado com base no relatório do Ombudsman do LNLS e considera as seguintes variáveis: qualidade da fonte de luz síncrotron, qualidade do apoio administrativo, qualidade do alojamento e refeição. O índice deverá permanecer inalterado.

Fórmula:

A partir do questionário do “Ombudsman” do LNLS são destacados três itens: qualidade da fonte de luz síncrotron e do apoio técnico, qualidade do apoio

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

administrativo (SAU) e qualidade da refeição e alojamento e ponderadas as questões satisfatórias, para cada item em 60%, 30% e 10% respectivamente.

Memoria de Cálculo:

1- Qualidade FLS e Apoio Técnico = Peso 60%

Itens	Qualidade FLS	Apoio Técnico	Total
Além do esperado	16	36	52
De acordo	70	52	122
Aquém	06	04	10
Total de Entrevistados	92	92	184
Total (Além e de acordo)	86	88	164

Cálculo $(164 * 60\%)$ e $(184*60\%) = 104,4$ e $110,4$

2 - Qualidade Apoio Administrativo = Peso 30%

Itens	Apoio Administrativo	Total
Além do esperado	49	49
De acordo	40	40
Aquém	0	0
Total de Entrevistados	89	89
Total (Além e de acordo)	89	89

Cálculo $(89*30\%)$ e $(89*30\%) = 26,7$ e $26,7$

3 – Alojamento e Refeição = Peso 10%

Itens	Alojamento	Refeição	Total
Além do esperado	43	24	67
De acordo	41	48	89
Aquém	2	19	21
Total de Entrevistados	86	91	177
Base (Além e de acordo)	84	72	176

Memória de cálculo $(176*10\%)$ e $(177*10\%) = 15,6$ e $17,6$

Ind. 8 = $(104,4+26,7+15,6) / (110,4+26,7+17,7) = (146,7/154,8)*100 = 95\%$

9 – Números total de publicações

Previsto: 100 artigos em periódicos indexados

Realizado: 51 artigos em periódicos indexados

Durante o 1º semestre de 2003 foram publicados um total de 51 artigos em periódicos indexados. Lembramos que esta informação tem origem no pesquisador e pode não estar completa, apesar do esforço feito durante o ano todo para captação e atualização o banco de dados de produção bibliográfica. Estima-se o alcance da meta pactuada. Uma solicitação formal aos pesquisadores é feito apenas no final do ano.

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

10 – Publicações resultantes por pesquisadores da ABTLuS

Previsto: 2,5 artigos por pesquisador interno

Realizado: 1,2 artigos por pesquisador interno

Durante o 1º semestre de 2003 foram publicados 25 artigos em periódicos indexados por 21,5 pesquisadores internos da ABTLuS. Para efeito do cálculo do indicador, considera-se o artigo em periódicos indexados que tenha o nome do pesquisador da ABTLuS, como um dos autores. Portanto, foram publicados cerca de 1,2 artigos em periódicos indexados por pesquisador da ABTLuS.

Com a atualização anual do banco de dados da produção bibliográfica, o indicador deverá aproximar-se do pactuado.

11 – Taxa de orientação de pós-graduados

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

Realizado: 1,7 pós-graduado sob orientação por pesquisador interno

Estão sendo orientados 36 alunos de pós-graduação.

12 – Taxa de supervisão de pós-doutores

Previsto: 1 pós-doutor sob supervisão de pesquisador interno

Realizado: 0,7 pós-doutor sob supervisão de pesquisador interno

Estão sendo supervisionados 14 pós-doutores. Será intensificada a divulgação das vagas existentes durante o exercício corrente.

13 – Número de Notas Técnicas disponibilizadas na internet

Previsto: 10 notas técnicas

Realizado: 3 notas técnicas

Foram produzidas no primeiro semestre de 2003 3 (três) notas técnicas, constante do apêndice E.1 – Publicações.

14 – Números de Estudos e Projetos

Previsto: 5 estudos ou projetos

Realizado: 3 estudos e projetos

Durante o primeiro semestre de 2003 foram mantidos 2 projetos com indústria, sendo um com a GETEC Guanabara Química Industrial AS e o outro com a Hewlett

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

Packard – HP. Ainda, nesse semestre, iniciou e concluiu-se a parceria técnico científico no desenvolvimento de módulos de potência com Laboratório Societé Synchrotron Soleil da França.

15 – Números de técnicos externos treinados

Previsto: 25 técnicos treinados

Realizado: 21 técnicos treinados

Estão sendo treinados 21 estagiários no Programa de Estágios de Ensino Médio implementado em 2002 pela ABTLuS. A expectativa é de atingir a meta pactuada.

16 – Número de pesquisadores externos treinados

Previsto: 250 pesquisadores

Realizado: 42 pesquisadores

No primeiro semestre de 2003 foi realizado um curso e um mini-curso, tendo sido treinados 42 pesquisadores. Está previsto no calendário de programação para início no segundo semestre vários cursos, mini-cursos, encontros e oficinas, o que possibilitará o alcance da meta pactuada, dependendo da viabilização dos recursos para a Rede Nacional de Biologia Estrutural.

7 – Horas de treinamento por funcionário

Previsto: 17 horas por funcionário

Realizado: 7 horas por funcionário

No primeiro semestre de 2003 foram realizadas 2055 horas de treinamento para uma força de trabalho de 282 pessoas. Alternativa para retomarmos treinamentos de longa duração serão consideradas para o 2º semestre de 2003.

18 – Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão

Previsto: 30% de alavancagem

Realizado: 52% de alavancagem

Os recursos do Contrato de Gestão recebidos no 1º semestre de 2003 totalizaram R\$ 7.714 mil. Os recursos de agências de fomento, receitas de aplicações financeiras, vendas e outras fontes, na ordem de R\$ 3.987 mil. A expectativa é de atingir a meta pactuada.

Espera-se, também, a recomposição do contingenciamento por meio de novos termos aditivos.

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

D – CONCLUSÃO

A ABTLuS teve, no final de 2002, uma recomposição parcial dos recursos financeiros do orçamento previsto para aquele ano. Para 2003, o 8o. Termo Aditivo foi assinado no final de Março com recursos reduzidos em 16% em relação ao previsto no Orçamento da União. Mesmo nestas condições, optou-se por operar o LNLS regularmente, inclusive com recomposição dos estoques de peças e equipamentos, necessários para a operação com alta confiabilidade das instalações sofisticadas que são disponibilizadas para a comunidade científica e tecnológica. Para o segundo semestre de 2003, poderá haver uma revisão dos Indicadores de Metas pactuados caso não haja perspectiva de recomposição orçamentária através de novos Termos Aditivos.

Neste semestre, portanto, a ABTLuS operou para os usuários, como laboratório aberto, dez linhas de luz, ao laboratório de microscopia eletrônica, o laboratório de ressonância magnética nuclear e o laboratório de microfabricação. Além destes, os usuários puderam contar com vários laboratórios de apoio. A SmolBNet operou regularmente, com alguns grupos já apresentando resultados. A Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural iniciou seus trabalhos. Os usuários das redes, além das instalações abertas, contam com os laboratórios de apoio/científicos – clonagem, purificação, caracterização, cristalização - e com o apoio técnico e científico dos pesquisadores do LNLS para a realização de seus projetos.

Neste ano a ABTLuS retomou os investimentos nas suas instalações. Os melhoramentos no anel de armazenamento foram realizados, a linha de luz XPD, financiada pelo Projeto CT-Infra 1, foi concluída e está sendo instalada enquanto que a linha de luz SAXS II, financiada por recursos do Contrato de Gestão, está em estágio avançado de construção. A linha de luz MAD, financiada parcialmente pela FAPESP, está sendo projetada.

Para o segundo semestre está prevista a abertura para usuários da linha de luz DXAS e o comissionamento da XPD. Além disso, devemos avançar no projeto e construção das linhas de luz SAXS-II, XAS-II e da linha de luz para cristalografia de proteínas com técnica MAD. A linha de luz de fluorescência para aplicações em biologia depende da liberação financeira da FAPESP. Está previsto também avançar no projeto da linha de espectroscopia UV do ondulador.

Está previsto para o final do segundo semestre uma segunda parada do anel de armazenamento onde prevemos, além de trabalhos de manutenção, a instalação da câmara de vácuo do *wiggler* e a duplicação do sistema de RF.

Ainda este ano está prevista a conclusão da instalação do Laboratório de Filmes Finos.

Finalmente, salientamos a realização da 5a. reunião do Comitê Técnico Científico do LNLS (a 3a. após a operação do laboratório pela ABTLuS) em fevereiro deste ano.

E – Apêndices

E.1 – Publicações

Artigo em Periódico Indexados por pesquisadores da ABTLuS [os nomes sublinhados são de pesquisadores do quadro próprio da ABTLuS]

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

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

FEBS Letters, 533: 14-20 (2003)

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

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

Biological Chemistry, 384: 25-37 (2003)

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

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

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

4-Polarization dependent effects in photo-fragmentation dynamics of free molecules

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

Chemical Physics, 289: 163-74 (2003)

5-Low resolution structures of the retinoid X receptor DNA-binding and ligand-binding domains revealed by synchrotron X-ray solution scattering

Fischer, H., Dias, S. M. G., Santos, M. A. M., Alves, A. C., Zanchin, N. I. T., Craievich, A. F., Apriletti, J. W., Baxter, J. D., Webb, P., Neves, F. A. R., Ribeiro, R. C. J., Polikarpov, I.

The Journal of Biological Chemistry, 278: 16030-8 (2003)

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

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

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

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

7- Structural comparison of Escherichia coli L-asparaginase in two monoclinic space groups

Sanches, M., Barbosa, J. A. R. G., Oliveira, R. T., Neto, J. A., Polikarpov, I.

Acta Crystallographica D, 59: 416-22 (2003)

8- The influence of oxygen in the photoexpansion of GaGeS glasses

Messaddeq, S. H., Mastelaro, V. R., Tabacniks, M. H., Lezal, D., Ramos, A. Y., Messaddeq, Y.

Applied Surface Science, 205: 143-50 (2003)

9 - Geometrical information on core-excited states obtained from interference quenching of vibrational states in resonant X-ray photoemission

Baev, A., Feifel, R., Gel'Mukhanov, F. K., Agren, H., Piancasteli, M. N., Bässler, M., Miron, C., Brito, A. N. de, Björneholm, O., Karlsson, L., Svensson, S.

Physical Review A, 67: 022713 (2003)

10- Influence of chemical bonds on the lifetime of the molecular-field-split 2p levels in H₂S

Brito, A. N. de, Fink, R. F., Bässler, M., Björneholm, O., Burmeister, F., Feifel, R., Miron, C., Sorensen, S. L., Wang, H., Svensson, S.

Physical Review A, 67: 022714 (2003)

11- Influence of the coupling between center of mass and internal degrees of freedom on the binding energy of magnetotriions

Dacal, L. C. O., Brum, J. A.

Physical Review B, 67: 033306-1-4 (2003)

12- Role of structural evolution in the quantum conductance behavior of gold nanowires during stretching

Rego, L. G. C., Rocha, A. R., Rodrigues, V., Ugarte, D.

Physical Review B, 67: 045412-1-10 (2003)

13-Role of structural evolution in the quantum conductance behavior of gold nanowires during stretching

Pinheiro, C. B., Marangoni, S., Toyama, M., Polikarpov, I.

Acta Crystallographica D, 59: 405-15 (2003)

14- The structure of the D49 phospholipase A2 piratoxin III from Bothrops pirajai reveals unprecedented structural displacement of the calcium-binding loop: possible relationship to cooperative substrate binding

Rigden, D. J., Wen-Hwa, L., Marangoni, S., Toyama, M. H., Polikarpov, I.

Acta Crystallographica D, 59: 255-62 (2003)

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

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

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

16- Cloning and expression of calglandulin, a new EF-hand protein from the Venom Glands of Bothrops insularis snake in E. coli

Junqueira-de-Azevedo, I.L.M., Pertinhez, T.A., Spisni, A., Carreño, F.R., Farah, C.S., Ho, P.L.

Biochimica et Biophysica Acta, 1648: 90-8 (2003)

17- Structural and thermal study of calcium undecanoate

Valor, A., Kycia, S. W., Torres-Garcia, E., Reguera, E., Vázquez-Ramos, C., Sanchez-Sinencio, F.

Journal of Solid State Chemistry, 172: 471-9 (2003)

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

18- Incorporation of Ni into natural goethite: an investigation by X-ray absorption spectroscopy

Carvalho-e-Silva, M. L. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Enzweiler, J., Netto, S. M., Alves, M. C. M.

American Mineralogist, 88: 876-82 (2003)

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

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

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

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

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

Chemical Physics, 289: 3-13 (2003)

21- Equilibrium model of bimodal distributions of epitaxial island growth

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

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

22- Introduction of a chemical constraint in a short peptide derived from human acidic fibroblast growth factor elicits mitogenic structural determina

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

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

23- Analysis of 6-(2,2-Dichloroacetamido) chrysenes interaction with the hypoxanthine phosphoribosyltransferase from Trypanosoma cruzi

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

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

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

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

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

Chemical Physics, 289: 51-6 (2003)

25- A Monte Carlo model of the MCD behavior of hematite colloids

Castro, A. R. B., Zysler, R. D.

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 257: 51-7 (2003)

Artigos Publicados em Periódicos Indexados por colaboradores e pesquisadores externos que utilizaram a infra-estrutura de pesquisa da ABTLuS

01-Determination of L-subshell Coster-Kronig and fluorescence yields of lanthanum and praseodymium by synchrotron radiation photoionization

Barrea, R. A., Perez, C. A., Sánchez, H. J.

Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 58: 51-62 (2003)

02- Isothermal aggregation of Bi atoms embedded in a soda borate glass: coarsening of liquid nanodroplets and atomic diffusion

Kellermann, G., Craievich, A. F.

Physical Review B, 67: 085405-1-7 (2003)

03- Setup for in situ WAXS/SAXS studies of the formation and growth of Bi nanodroplets and the melting of Bi nanocrystals using synchrotron radiation

Kellermann, G., Craievich, A. F., Neuenschwander, R. T., Plivelic, T. S.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 199: 112-6 (2003)

04-Purification and primary structure determination of Tf4, the first bioactive peptide isolated from the venom of the Brazilian scorpion Tityus fasciolatus

Wagner, S., Castro, M. S., Barbosa, J. A. R. G., Fontes, W., Schwartz, E. N. F., Sebben, A., Pires Jr., O. R., Sousa, M. V., Schwartz, C. A.

Toxicon, 41: 737-45 (2003)

05- LixMn2O4 thin films characterization by X-ray, electrical conductivity and XANES

Meneses, C. T., Macedo, M. A., Vicentin, F. C.

Microelectronics Journal, 34: 561-3 (2003)

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

06- EXAFS, X-ray diffraction and Mossbauer studies of an amorphous Fe₆₀Ti₄₀ alloy produced by mechanical alloying

Lima, J. C., Machado, K. D., Drago, V., Grandi, T. A., Campos, C. E. M., Trichês, D. M.

Journal of Non-Crystalline Solids, 318: 121-30 (2003)

07- Structural characterization of the V₂O₅/TiO₂ system obtained by the sol-gel method

Rodella, C. B., Mastelaro, V. R.

Journal of Physics and Chemistry of Solids, 64: 833-9 (2003)

08- Characterization of iron, copper and zinc levels in colostrum of mothers of term

Costa, R. S. S. da, Carmo, M. G. T. do, Saunders, C., Jesus, E. F. O. de, Lopes, R. T., Simabuco, S. M.

International Journal of Food Science and Nutrition, 54: 111-7 (2003)

09 - About the nanoporosity elimination above 800' C xerogels prepared from TEOS sono-hydrolysis

Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Silva, J. S. P. da

Physica Status Solidi A, 196: 379-83 (2003)

10- Characterization of the porosity developed in a new titania-alumina catalyst support prepared by the sol gel route

Kaneko, E. Y., Pulcinelli, S. H., Santilli, C. V., Craievich, A. F., Chiaro, S. S. X.

Journal of Applied Crystallography, 36: 469-72

11 - Domain motions and quaternary packing of phosphofructokinase-2 from Escherichia coli studied by small angle X-ray scattering and homology modeling

Fischer, H., Trapani, S., Craievich, A. F., Garratt, R. C.

The Journal of Biological Chemistry, 278: 12913-9 (2003)

12- Gelation and drying of weakly bonded silica-PPO nanocomposites

Chaker, J. A., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Craievich, A.

Journal of Applied Crystallography, 36: 689-93 (2003)

13- Nanostructure and properties of ZnO films produced by pyrosol process

Hammer, P., Tokumoto, M. S., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F., Smith, A.

Journal of Applied Physics, 36: 435-8 (2003)

14- The peculiar thermo-structural behavior of the anionic lipid DMPG

Lamy-Freund, T., Riske, K. A.

Chemistry and Physics of Lipids, 122: 19-32 (2003)

15- Small-angle X-ray and nuclear-magnetic resonance study of siloxane-PMMA hybrids prepared by the sol-gel process

Sarmiento, V. H. V., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F.

Journal of Applied Crystallography, 36: 473-7 (2003)

16- Small-angle X-ray scattering and X-ray absorption near-edge structure study of iron-doped siloxane-polyoxyethylene nanocomposites

Chiavacci, L. A., Dahmouche, K., Briois, V., Santilli, C. V., Bermudez, V. Z., Carlos, L. D., Jolivet, J. P., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F.

Journal of Applied Crystallography, 36: 405-9 (2003)

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

17- Structural characterization of undoped and Sb-doped SnO₂ thin films fired at different temperatures

Rizzato, A. P., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F.

Journal of Applied Crystallography, 36: 736-9 (2003)

18- Structural and magnetic properties of TM-SiO₂ (TM = Fe, Co, Ni) films

Socolovsky, L.M., Denardin, J. C., Brandl, A. L., Knobel, M., Zhang, X. X.

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 262: 102-6 (2003)

19- Synchrotron SAXS study of the mechanisms of aggregation of sulfate zirconia sols

Riello, P., Minesso, A., Craievich, A., Benedetti, A.

Journal of Physical Chemistry B, 107: 3390-9 (2003)

20- Structure of luminescent mono and di-urethanesil nanocomposites doped with Eu³⁺ ions

Dahmouche, K., Gonçalves, M. C., Santilli, C. V., Bermudez, V. Z., Carlos, L. D., Craievich, A. F.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 199: 117-22 (2003)

21- Time evolution of Cr and N on AISI 304 steel surface during pulsed plasma ion nitriding

Feugeas, J. N., Gomez, B. J., Sánchez, G, Ferron, J., Craievich, A.

Thin Solid Films, 424: 130-8 (2003)

22 - Trifluoperazine effects on anionic and zwitterionic micelles: a study by small angle X-ray scattering

Caetano, W., Barbosa, L. R. S., Itri, R., Tabak, M.

Journal of Colloid and Interface Science, 260: 414-22 (2003)

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

23- *Structural study aged saturated silica gels obtained from tetramethoxysilane sonohydrolysis with different water/tetramethoxysilane molar ratio*

Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Castro, W. C. de

Physical Review B, 67: 184207-1-5 (2003)

24- *The silicon neighborhood across the α -Si:H to μ c-Si transition by X-ray absorption spectroscopy (XAS)*

Tessler, L. R., Wang, Q., Branz, H. M.

Thin Solid Films, 430: 83-6 (2003)

25- *Preparation and characterization of TiO₂ and V₂O₅ nanoparticles produced by ball-milling*

Guimarães, J. L., Abbate, M., Alves, M. C. M., Betim, S. B.

Journal of Alloys and Compounds, 352: 16-20 (2003)

26- *XAS study of the nickel(α -diimine) catalyst for olefin polymerization*

Souza, R. F. de, Simon, L. C., Alves, M. C. M.

Journal of Catalysis, 214: 165-8 (2003)

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

Lista da Documentação Técnica disponibilizada na Internet no primeiro semestre de 2003.

1- A hybrid multipolar wiggler for protein crystallography

Lin, Liu, Tavares, P. F.

Memorando de Projeto, MeT 01/2003

2- Numerical modeling of atomic hydrogen response to short VUV FEL radiation pulses

Castro, A. R. B.

Memorando Técnico, MeT 02/2003

3- Period Length optimization of the LNLS undulator

Resende, X. R.

Memorando Técnico, MeT 03/2003

E.2 – Parecer dos Auditores Independentes

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

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

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

Desde então foram apresentados os seguintes relatórios:

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

Relatório Semestral
2003

Julho de 2003

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

Este relatório foi aprovado pelo Conselho de Administração da ABTLuS – Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron – em reunião ordinária realizada em 12 de agosto de 2003.

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