

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**MEMBROS DO CONSELHO DE ADMINISTRAÇÃO DA ABTLuS**

Rogério Cezar de Cerqueira Leite  
**(Presidente)**

Adalberto Vasquez

Antônio Rubens Britto de Castro

Belita Koiller

Celso Antonio Barbosa

Celso Varga

Cláudio Rodrigues

Fernando Cláudio Zawislak

Marcelo Juni Ferreira

Ricardo Magnus Osório Galvão

Waldimir Pirró e Longo

**DIRETORIA DA ABTLuS**

**Diretor-Geral**

José Antônio Brum

**Diretor Associado**

Pedro Fernandes Tavares

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**CONTEÚDO**

<b>SUMÁRIO EXECUTIVO.....</b>	<b>6</b>
<b>1. P, D &amp; I com Luz Síncrotron.....</b>	<b>8</b>
<b>1. 1 Fonte de Luz Síncrotron.....</b>	<b>8</b>
<b>1. 2 Manutenção das Linhas de Luz.....</b>	<b>13</b>
<b>1. 3 Melhoramentos nas Linhas de Luz.....</b>	<b>13</b>
<b>1. 4 Implementar Novas Linhas de Luz.....</b>	<b>16</b>
<b>1. 5 Uso das Linhas de Luz.....</b>	<b>20</b>
<b>2. P, D &amp; I em Micro e Nano-Tecnologia.....</b>	<b>25</b>
<b>2. 1 Manutenção e Melhoramento da infra-estrutura.....</b>	<b>25</b>
<b>2. 2 Apoio aos Pesquisadores-Usuários.....</b>	<b>28</b>
<b>3. P, D &amp; I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia.....</b>	<b>34</b>
<b>3. 1 Manutenção e Melhoria da Infra-estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia.....</b>	<b>34</b>
<b>3. 2 Apoiar Pesquisadores Externos com a Infra-estrutura de Pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia.....</b>	<b>35</b>
<b>4. P, D &amp; I em Aceleradores.....</b>	<b>41</b>
<b>4. 1 Comissionamento do Wiggler Multipolar.....</b>	<b>41</b>
<b>4. 2 Melhoramentos na Blidagem da Fonte de luz Síncrotron.....</b>	<b>42</b>
<b>4. 3 Estudos de Estabilidade de Órbita do Feixe de Elétrons.....</b>	<b>43</b>
<b>4. 4 Monitores de Posição de Raios-X.....</b>	<b>44</b>
<b>4. 5 Novos desenvolvimentos no Sistema de Controle.....</b>	<b>45</b>
<b>4. 6 Construção do Ondulador.....</b>	<b>46</b>
<b>4. 7 Outras atividades.....</b>	<b>47</b>
<b>5. Interação com o Setor Industrial.....</b>	<b>48</b>
<b>5. 1 Projetos em desenvolvimento.....</b>	<b>48</b>
<b>5. 2 Serviços.....</b>	<b>51</b>
<b>6. Informação, educação e Divulgação.....</b>	<b>53</b>
<b>6. 1 Informação científica e Administrativa.....</b>	<b>53</b>
<b>7. Gestão e Planejamento.....</b>	<b>63</b>
<b>7. 1 Relatório Financeiro.....</b>	<b>64</b>
<b>C. INDICADORES DE DESEMPENHO.....</b>	<b>68</b>
<b>D. CONCLUSÃO.....</b>	<b>80</b>
<b>E. APENDICES.....</b>	<b>82</b>

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**LISTAS DE TABELAS**

Tabela 1	Parâmetros de desempenho da fonte de luz síncrotron em 2005.....	11
Tabela 2	Uso da fonte de luz síncrotron em 2005.....	12
Tabela 3	Linhas de luz em operação para os usuários.....	13
Tabela 4	Melhoramentos nas linhas de luz.....	14
Tabela 5	Linhas de luz do LNLS em construção ou projetadas.....	16
Tabela 6	Distribuição geográfica das propostas de pesquisas realizadas.....	21
Tabela 7	Propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz.....	21
Tabela 8	Principais parâmetros de uso das linhas de luz.....	24
Tabela 9	Resumo dos dados depositados no banco da SMoIBNet (BDNet).....	36
Tabela 10	Resumo dos períodos de experimentos dos Usuários da SMoIBNet..	37
Tabela 11	Pesquisadores da ABTLuS.....	56
Tabela 12	Pós-doutores supervisionados pelos pesquisadores da ABTLuS.....	57
Tabela 13	Estudantes de doutorados orientados pelos pesquisadores da ABTLuS.....	58
Tabela 14	Estudantes de mestrado orientados pelos pesquisadores da ABTLuS.....	59
Tabela 15	Estudantes de iniciação científica orientados em 2005.....	59
Tabela 16	Cursos realizados no LNLS em 2005.....	60
Tabela 17	Demonstração das receitas e despesas do período.....	66

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**LISTA DE GRÁFICOS**

Gráfico 1	Tempo de vida médio do feixe durante a operação para usuários...	11
Gráfico 2	Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em 2005.....	12
Gráfico 3	Evolução do número de pesquisas realizadas nas linhas de luz.....	23
Gráfico 4	Demanda de propostas de pesquisas no LME.....	29
Gráfico 5	Distribuição das propostas de pesquisas submetidas no LME em 2005.....	29
Gráfico 6	Operação dos Microscópios Eletrônicos em 2005.....	30
Gráfico 7	Perfil dos usuários do LME em 2005.....	30
Gráfico 8	Origem dos usuários do AFM.....	31
Gráfico 9	Utilização do AFM durante o ano de 2005.....	31
Gráfico 10	Distribuição por tempo de uso do LMF em 2005.....	32
Gráfico 11	Resumo do tempo de uso do aparelho de RMN de 500 MHz.....	39
Gráfico 12	Resumo do tempo de uso do aparelho de RMN de 600 MHz.....	39
Gráfico 13	Resumo do tempo de uso do equipamento Q-TOF em 2005.....	40
Gráfico 14	Evolução das publicações de artigos em periódicos indexados.....	61
Gráfico 15	Orçamento do Contrato de Gestão da ABTLuS.....	64
Gráfico 16	Repasse e gastos 2005.....	65
Gráfico 17	Perfil da força de trabalho da ABTLuS.....	67
Gráfico 18	Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron.....	71

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**LISTA DE FIGURAS**

Figura 1	Monocromador de duplo cristal da MX2.....	17
Figura 2	Experimentos feitos com amostras padrão, utilizando um detector linear sensível à posição.....	18
Figura 3	Projeto da nova linha do ondulator .....	20
Figura 4	O wiggler sendo instalado e visão do gap do wiggler aberto.....	42
Figura 5	Vista de uma das paredes de chumbo instaladas nas saídas dos dipolos do anel de armazenamento.....	43
Figura 6	Montagem, em seu suporte, de dois cassetes do protótipo do ondulator em construção no laboratório do ímãs do LNLS.....	46

## **SUMÁRIO EXECUTIVO**

### **As principais atividades durante 2005 foram:**

- O fornecimento de 3931 horas de feixe para realização de experimentos nas linhas de luz síncrotron. Este valor corresponde a 98% do tempo pactuado;
- A confiabilidade que atingiu 94,4%, superior ao pactuado (93%);
- A disponibilização de onze linhas de luz em operação para usuários, fornecendo 38.651 horas de linhas de luz, correspondente a 90% do tempo pactuado;
- O fechamento da linha de luz XRL, devido a falta de usuários, demonstrada ao longo de vários anos. A linha de luz está sendo avaliada para uma reestruturação e adaptação para outro tipo de experimento;
- A conclusão da instalação da segunda linha de luz de espalhamento de raios-X a baixos ângulos e início do seu comissionamento em maio de 2005; a linha será entregue aos usuários em 2006;
- A conclusão da instalação da linha de luz de fluorescência no visível e ultravioleta para aplicações em biologia e química e o início de seu comissionamento;
- A reforma na linha SGM, o que permitirá uma melhor qualidade de feixe de luz entregue aos usuários;
- O desenvolvimento do projeto para a construção do prédio César Lattes e a obtenção dos recursos – através da FINEP – para sua construção;
- A aquisição de dois *robôs* de cristalização com o objetivo de aumentar a eficiência do processo de cristalização de proteínas;
- A operação das redes de biologia molecular estrutural, atendendo 33 pesquisadores na rede estadual e 9 pesquisadores na rede nacional;
- A operação do laboratório de espectrometria de massas como instalação aberta, apesar das dificuldades encontradas com o equipamento MALDI-TOF-TOF que precisou ser trocado pelo fornecedor devido a problemas na sua construção;

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

- A instalação e comissionamento do *wiggler* multipolar, primeiro dispositivo de inserção instalado no LNLS;
- A conclusão da nova blindagem no anel de armazenamento;
- A construção do ondulador, segundo dispositivo de inserção do LNLS, que será concluída em 2006;
- O desenvolvimento de 7 projetos de cooperação industrial;
- A realização de 647 propostas de pesquisa, sendo 423 nas linhas de luz, 138 no Laboratório de Microscopia Eletrônica, 6 no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, 19 no Laboratório de Microfabricação, 19 no Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento e 42 no Laboratório de Espectrometria de Massas;
- A publicação de 216 artigos científicos em periódicos indexados, sendo 11 em revistas com fator de impacto maior que 5.

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

### 1. P, D & I com Luz Síncrotron

#### 1.1 – Fonte de Luz Síncrotron

Dois eventos marcantes de 2005 tiveram influência sobre a operação da Fonte de Luz Síncrotron: a instalação e operação, com grande êxito, do primeiro dispositivo de inserção em nosso anel de armazenamento (*wiggler* multipolar de 2.0 T) e o término das instalações de uma cobertura de concreto para a Fonte de Luz. Na verdade, ambos são resultado de esforços já em andamento desde o ano anterior. De fato, o final de 2004 foi marcado por duas grandes intervenções no anel de armazenamento. A primeira, para a qual se cogitava um pequeno efeito sobre as condições de operação da fonte de luz síncrotron, foi a instalação de grande parte da cobertura do anel de armazenamento. A cobertura é parte essencial da nova blindagem que, uma vez instalada e devidamente certificada, deve permitir que o processo de injeção no anel seja realizado sem que haja a necessidade da evacuação do hall experimental. A segunda intervenção teve um impacto sensível sobre a operação, pois implicou no arejamento de três seções do anel de armazenamento. Foram instalados três novos *kickers* (magnetos pulsados utilizados no processo de injeção) o *front-end* da linha de luz que utilizará a radiação produzida pelo *wiggler* multipolar, a câmara de vácuo do *wiggler* e foi realizada a substituição de uma máscara de absorção de raios-X na linha SGM. Por fim, houve a necessidade de substituir uma válvula de vácuo setorial defeituosa do anel que apresentava problemas de estanqueidade. Essas válvulas isolam setores do anel de armazenamento tornando possível a ventilação de um trecho sem que os demais sejam afetados. Para que essas intervenções pudessem ser realizadas foi necessário abrir a câmara de vácuo do anel em alguns trechos.

Nos *kickers* antigos o núcleo ferromagnético (ferrite) ficava acondicionado dentro da própria câmara de vácuo, sob a ação dos campos eletromagnéticos produzidos pelo próprio feixe e, portanto, suscetível a aquecimento e conseqüente alteração de suas propriedades magnéticas. Nos novos componentes o núcleo de ferrite está fora da câmara de vácuo. As câmaras de vácuo originais foram substituídas por novas câmaras cerâmicas, recobertas em sua superfície interior por um filme de Titânio que garante tanto a condutibilidade elétrica da câmara quanto a blindagem do meio exterior aos campos eletromagnéticos do feixe. Esses novos trechos da câmara de vácuo tiveram que ser condicionados para vácuo *in situ*.



## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

A instalação da câmara de vácuo do *wiggler*, com abertura vertical interna de 19 mm teve um impacto menor sobre as condições de vácuo, em função desta câmara contar com bombeamento distribuído propiciado pela deposição, em sua superfície interna, de um filme de *NEG (non-evaporable getter)*, material com alto poder adsorvente. As instalações do *front-end* e da máscara refrigerada tiveram um impacto maior sobre o vácuo por serem regiões que recebem incidência direta da radiação síncrotron, sendo pontos de grande aquecimento, com alto índice de degasagem e, conseqüentemente, alta pressão de base.

Ainda que as intervenções na câmara de vácuo tenham sido realizadas ao longo do primeiro mês e meio da parada do final do ano de 2004, todo o restante da parada não foi suficiente para que as condições ideais de vácuo fossem recuperadas para o início das operações dos usuários em 2005. A quebra do vácuo é sempre um procedimento indesejável em função do longo tempo de recuperação das condições de operação do acelerador, porém inevitável sempre que novos dispositivos precisam ser instalados. Esses dispositivos são necessários tanto no sentido de melhorar o desempenho do equipamento, quanto para responder à demanda dos usuários por luz com características específicas que só pode ser produzida com a introdução de dispositivos especiais na rede magnética do acelerador, como é o caso do *wiggler* multipolar. Por fim, parte importante do tempo que poderia ter sido destinado ao condicionamento da câmara de vácuo teve que ser utilizado para a instalação da nova blindagem, procedimento também prioritário.

O efeito das condições de vácuo não ideais foi sentido ao longo dos dois primeiros meses de operação da fonte de luz síncrotron. Essas condições afetam não apenas a operação normal da máquina em alta energia, o que se faz sentir pela diminuição do tempo de vida do feixe, mas, principalmente, no processo de injeção. Em baixa energia os efeitos da alta pressão fazem-se sentir pelo efeito nocivo causado pela ionização do gás residual presente na câmara de vácuo sobre o ponto de operação do anel de armazenamento. Por afetar as sintonias da máquina, faz com que sejam necessárias mudanças nas configurações de injeção e de rampa. Como a condição do vácuo melhora continuamente, de injeção para injeção, isso significa que nesse período de condicionamento as condições de operação da máquina mudam mais do que o normal de uma injeção para outra. Além disso, a necessidade de se trabalhar em diferentes pontos de operação tem efeito sobre as condições de

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS** **Relatório Anual de 2005**

estabilidade do feixe, afetando, em particular, as eficiências de injeção e rampeamento do feixe acumulado para a alta energia.

As tabelas e gráficos apresentados a seguir refletem bem o efeito indesejável das condições de vácuo não-ideais. Na tabela 1 apresentamos as características do feixe ao longo do ano enquanto que no gráfico 1 detalhamos o tempo de vida médio. Em janeiro, particularmente, pode-se observar que o tempo de vida assim como a corrente média do feixe, a confiabilidade e o desempenho da máquina, estiveram muito abaixo do que se atingiu nos meses posteriores. Pode-se ver a contínua melhora desses parâmetros à medida que a câmara de vácuo foi sendo condicionada pelo próprio feixe de elétrons, com a conseqüente redução da pressão média. Ao final de junho a fonte já apresentava resultados próximos dos obtidos no segundo semestre de 2004.

O desempenho da fonte de luz manteve-se excelente até o final de setembro quando um acidente de vácuo na linha TGM elevou a pressão de um dos trechos do anel de armazenamento, forçando o cancelamento dos turnos para usuários por um período de uma semana. Ainda que a fonte tenha voltado a operar para usuários já no início de outubro, houve um comprometimento no tempo de vida do feixe e, conseqüentemente, na corrente média por turno de operação. Os efeitos do acidente são claramente visíveis nos indicadores, que apresentam para setembro o reflexo do cancelamento de alguns turnos (confiabilidade de 79%) e para outubro o reflexo das condições não-ideais de vácuo (desempenho abaixo da média). Somente no final de novembro o tempo de vida do feixe voltou a um patamar próximo do que estava antes do acidente. Este evento exemplifica o quão relevante é a pressão da câmara de vácuo para o desempenho da fonte de luz síncrotron.

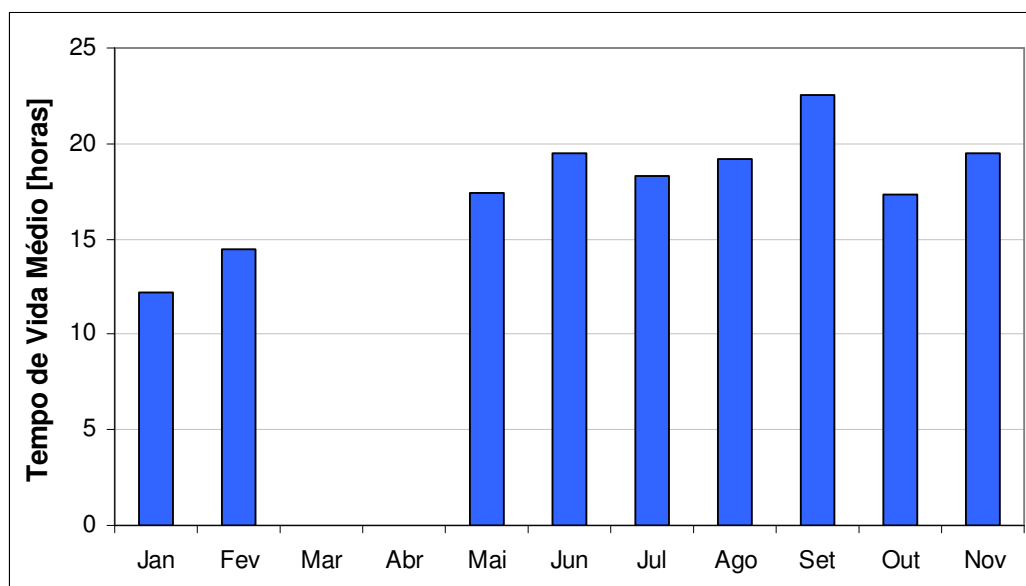
Na tabela 2 apresentamos a distribuição no tempo da utilização da fonte de luz síncrotron ao longo do ano. Em 2005 a fonte de luz operou em regime contínuo nos períodos de janeiro-fevereiro e maio-novembro, funcionando 24 horas por dia durante a semana. Nos finais de semana a fonte operou para testes de subsistemas, estudos de máquina e condicionamento de vácuo. Durante as duas primeiras semanas de dezembro, a fonte operou no modo de pacote único (*single-bunch*) para usuários das linhas SGM, SXS e TGM. A tabela 2 demonstra a distribuição do tempo de tempo por atividade ao longo do ano. No total, foram fornecidas 3.931 horas de feixe para usuários, sendo 3.806 horas durante turnos programados e 125 horas em turnos extraordinários, cumprindo 98% do tempo de feixe previsto para o ano (4000 horas).

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

Para 2006 a programação anual foi realizada tomando como base períodos de injeção de 45 minutos, 15 minutos a mais por injeção do que o programado para os últimos anos. Durante os meses de março e abril não houve operação para usuários em função da instalação e comissionamento do *wiggler* multipolar. Foram registradas 226 horas de falhas durante os horários programados, resultando num índice de confiabilidade de 94,4%, acima do índice de 93% pactuado para este ano. Deve-se salientar que a confiabilidade em janeiro e em setembro esteve abaixo do pactuado pelas razões já expostas. Confiabilidade e desempenho, juntos, dão um bom indicativo da melhora progressiva do desempenho da fonte de luz ao longo do ano.

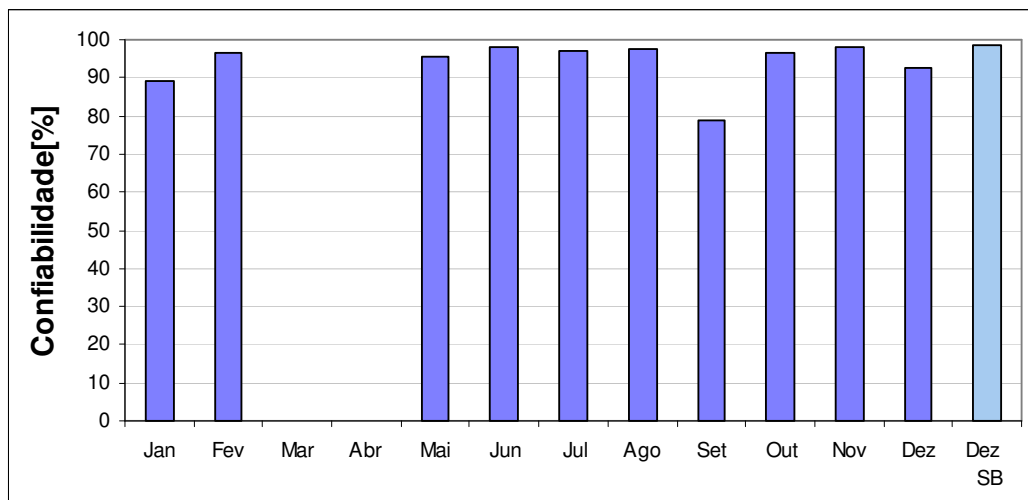
Parâmetros de Desempenho Operacional da Fonte de Luz Síncrotron em 2005															
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Dez SB	Media	
Corrente Inicial Média	215	227	0	0	239	241	239	233	229	239	247	238	7	236	mA
Corrente Média	128	153	0	0	174	179	175	170	178	169	181	182	19	169	mA
Tempo de Vida Médio	12,3	14,5	0,0	0,0	17,5	19,5	18,3	19,2	22,5	17,3	19,5	23,3	17,1	18	h
Corrente Integrada	42,1	42,1	0,0	0,0	77,5	82,9	75,8	80,7	65,7	77,2	81,6	3,2	4,0	632,8	A.h
Tempo de Feixe Programado	365	283	0	0	452	460	445	479	460	422	457	19	193	4034	h
Tempo de Feixe durante o horário programado	326	273	0	0	432	451	431	467	363	408	448	17	190	3806	h
Tempo Total de Feixe	330	275	0	0	444	464	434	474	369	458	451	17	215	3931	h
Confiabilidade	89,3	96,3	-	-	95,6	98,0	96,8	97,7	79,0	96,6	98,1	92,4	98,5	94,4	%
Desempenho	85,8	98,5	-	-	110,8	114,7	111,8	110,5	116,2	108,5	116,2	119,5	ND	109,2	%

**Tabela 1: Parâmetros de desempenho da fonte de luz síncrotron em 2005.**



**Gráfico 1: Tempo de vida médio do feixe durante a operação para usuários em 2005.**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**



**Gráfico 2: Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em 2005**

O crescimento do tempo de vida médio do feixe é consequência da diminuição da pressão média no interior da câmara de vácuo do anel. A consequência do acidente de vácuo em setembro é visível no tempo de vida médio observado no mês seguinte.

Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2005 [horas]														
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Dez SB	Total
<b>Usuários</b>	330	275	0	0	444	464	434	474	369	458	451	17	215	3931
<b>Injeção</b>	13	12	0	0	25	24	18	22	21	18	19	1	16	189
<b>Estudos de Máquina</b>	175	137	74	44	6	14	27	6	0	20	62	0	47	611
<b>Manutenção</b>	39	102	98	127	23	21	23	42	17	15	17	0	23	547
<b>Comissionamento</b>	107	72	473	478	115	187	211	191	217	218	162	0	51	2481
<b>Máquina Desligada</b>	42	65	99	72	112	0	17	0	0	0	0	0	369	776
<b>Falha</b>	39	10	0	0	20	9	14	9	96	15	9	1	3	226
<b>Total</b>	744	672	744	720	744	720	744	744	720	744	720	-	744	8760
<b>Grau de Saturação</b>	94%	90%	87%	90%	85%	100%	98%	100%	100%	100%	100%	-	50%	91%
<b>Número de Dias</b>	31	28	31	30	31	30	31	31	30	31	30	-	31	365

**Tabela 2: Uso da fonte de luz síncrotron em 2005.**

O alto grau de saturação é um reflexo do esforço despendido na busca de soluções para os problemas de correção de órbitas.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**1.2 – Manutenção das Linhas de Luz**

Onze linhas de luz foram mantidas em operação durante o ano de 2005. A lista das linhas de luz em operação em 2005 é apresentada na tabela 3. A primeira coluna indica em qual dipolo do anel a linha está localizada e a sua denominação. A segunda coluna indica o tipo de monocromador e a faixa de energia para o qual a linha está otimizada. A terceira coluna indica campos de aplicações.

<b>Linha de Luz</b>	<b>Monocromador</b>	<b>Aplicação</b>
D03B: Cristalografia de Proteínas (CPR)	Cristal único curvo 6 – 12 keV	Biologia molecular estrutural, Estrutura de proteínas.
D04A: Espectroscopia de Raios-X Moles (SXS)	Duplo Cristal 0.8 – 4 keV	Espec. de fotoabsorção e fotoemissão de elétrons.
D04B: Espectroscopia de Absorção de Raios-X (XAS)	Cristal sulcado 3 – 24 keV	Ciência dos materiais, física e química; Filmes finos, óxidos e sistemas diluídos.
D05A: Espectroscopia de Ultra Violeta (TGM)	Grade toroidal (TGM) 12 – 300 eV	Superfície, átomos e moléculas; Espec. tempo de voo.
D06A: Absorção de Raios-X dispersivo (DXAS)	Cristal único focalizante 4 – 12 keV	Ciência dos materiais, estudos in-situ e dicroísmo magnético.
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.
D10B: Difração de Raios-X em policristais (XPD)	Duplo-cristal focalizante 4 – 15 keV	Estudos estruturais por difração em policristais.
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 em operação para usuários.**

**1.3 – Melhoramentos nas Linhas de Luz**

Na tabela 4 apresentam-se vários melhoramentos ligados à instrumentação das onze linhas de luz que estiveram operando com usuários durante 2005. Em geral estas melhorias visaram adaptar as linhas de luz para realização de experimentos

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

com amostras em novas condições de temperatura e pressão ou mesmo para um melhor aproveitamento do feixe de radiação.

<b>Linha de Luz</b>	<b>Melhoramentos</b>	<b>Objetivo</b>
D03B: Cristalografia de Proteínas (CPR)	Nenhuma melhoria realizada no período	
D04A: Espectroscopia de Raios-X Moles (SXS)	Instalação de uma fenda X-Y refrigerada a água antes do espelho toroidal	Melhor definição do feixe focalizado na amostra
	Instalação de um segundo sistema de fendas antes da amostra	Melhorar a performance em experimentos de refletividade
	Reforma da fonte de tensão do analisador de elétrons	Corrigir a calibração do analisador que foi alterada ao longo dos anos de uso
	Aquisição de um novo monocromador YB66 para raios-X moles na faixa de 1000-2000 eV	Espera-se atingir um fluxo pelo menos 10 vezes maior nesta faixa de energia
D04B: Espectroscopia de Absorção de Raios-X (XAS1)	Projeto, construção e testes de um forno com lâmpada Halogênia e um porta amostras de Quartzo	Este forno é de aquecimento rápido e pode chegar a temperaturas de até 1100°C
	Troca do cristal de Si 111 do monocromador.	O cristal anterior estava com uma refletividade inadequada devido à contaminação por Carbono ao longo dos seus 8 anos de uso
	Troca da janela de Berílio refrigerada de 125 µm por uma de 50 µm	Aumento de fluxo e recuperação da energia de operação (2.5 a 25 keV)
	Projeto e construção de um porta-amostras para líquidos compatível com o criostato	Experimentos com amostras líquidas
	Aquisição e testes de um detector de "silicon drift"	Medidas de fluorescência
D06A: Absorção de Raios-X dispersivos (DXAS)	Projeto e construção de um novo forno de altas temperaturas automatizado	Capacidade de atingir até 800°C trabalhando em vácuo ou atmosfera controlada
	Instrumentação para controle de pressão in-situ	Possibilitar experimentos com altas pressões <i>in-situ</i>
	Testes de uma nova célula de pressão capaz de chegar a 10 GPa em temperaturas de -150°C até 100°C	Possibilitar experimentos com altas pressões <i>in-situ</i>
D05A: Espectroscopia de Ultra-Violeta (TGM)	Instalação de um novo sistema de refrigeração para o primeiro espelho	Melhora da estabilidade do feixe na amostra por períodos mais longos
	Instalação da nova fenda monolítica projetada e construída no LNLS	Substituição da fenda anterior que foi danificada
	Desenvolvimento de um novo procedimento de monitoração da fenda	Controlar aberturas de até 1 µm
	Aprimoramento e comissionamento e desenvolvimento de um manual para o filtro de altos harmônicos	Aumentar a documentação e facilidade de uso do filtro
	Projeto e construção de um suporte para uma câmara com analisador de elétrons	Permitir medidas com o analisador de elétrons
	Desenvolvimento de um novo programa para automatização de alinhamento dos espelhos da linha	Aumentar a automatização da linha
	Desenvolvimento de uma web-page para linha	Disponibilizar informações sobre as capacidades e modos de operação da linha e suas estações experimentais

**Tabela 4: Melhoramentos nas linhas de luz**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<b>Linha de Luz</b>	<b>Melhoramentos</b>	<b>Objetivo</b>
D06B: Litografia de Raios-X (XRL)	Nenhuma melhoria realizada no período	
D08A: Espectroscopia de Raios-X Moles e Ultra-Violeta (SGM)	Recobrimento dos espelhos com Ouro (feito pela Zeiss/Alemanha) e re-instalação	Melhorar a refletividade dos espelhos
	Instalação de um sistema de refrigeração para o primeiro espelho	Diminuir a carga térmica e aumentar o tempo de vida útil do espelho
	Modificação e re-posicionamento da primeira máscara	Permitir maior flexibilidade de alinhamento
	Instalação de novas aberturas	Seleção de luz polarizada
	Automatização da Estação de Trabalho em Superfícies I e implementação de LEED quantitativo	Realizar experimentos de PED
	Substituição do bloco de concreto de suporte do monocromador por bloco isolado do piso	Melhorias na estabilidade da linha
D10A: Espalhamento e Difração Magnética (XRD2)	Medidas do fluxo de fótons e resolução em energia em toda região do espectro acessível na linha (4.5-16 KeV)	Caracterização técnica detalhada da linha
	Instalação e caracterização de um detector linear PSD a gás	Aumentar a capacidade de coleta de fótons espalhados em alguns tipos de experimentos
	Desenvolvimento de instrumentação para experimentos de espalhamento de raios-X a baixo ângulo	Capacitar a linha para experimentos de SAXS e GISAXS. A detecção pode ser feita com o detector linear ou por "image plate"
	Implementação de espalhamento anômalo de raios-X a baixo ângulo	Capacitar a linha para novos experimentos
D12A: Difração de Raios X (XRD1)	Automação e desenvolvimento de novos acessórios para solução de problemas técnicos específicos para implementação de topografia e tomografia por Raios X e espalhamento inelástico	Tornar a aquisição de dados mais rápida e confiável
	Aquisição de um computador mais rápido para melhorar a aquisição de dados	Tornar a aquisição de dados mais rápida e confiável
	Desenvolvimento de macros para controle do forno e do detetor linear (PSD)	Melhorar a automação da linha
D09A: Fluorescência de Raios-X (XRF)	Instalação de novas fendas Huber, uma de 25 mm e duas de 10 mm	Adaptação de novos arranjos experimentais
	Instalação de micrômetro 1mm/100div na estação experimental	Calibrar o campo de visão do microscópio ótico das estações experimentais de micro-XRF
	Instalação de nova flange para câmara de alto vácuo do detetor de energia e projeto e construção de um novo porta-amostras	Experimentos de TXRF para detecção de elementos leves
	Novo sistema mecânico para ajuste manual de fendas e foto-diodo para medidas de refletividade	Melhorar sistema de ajuste de fendas
	Projeto de uma pequena câmara de baixo vácuo	Posicionar um sistema de multi-camadas próximo a amostra (em construção)
	Projeto de desenvolvimento de experimentos em condições de feixe de saída rasante	Atender à demanda de novos experimentos de usuários

**Tabela 4: Melhoramentos nas linhas de luz (continuação)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<b>Linha de Luz</b>	<b>Melhoramentos</b>	<b>Objetivo</b>
D10B: Difração de Raios X em policristais (XPD)	Otimização de vários elementos da linha	Melhorar sua performance e facilidade de uso
	Automação de banhos térmicos: criostato comercial de ciclo fechado de He (10 K - 450 K) e um forno (feito no LNLS) (293 - 1273 K)	Sistema de condicionamento térmico da amostra totalmente automático
	Integração de um detector linear ao difratômetro totalmente operado pela plataforma SPEC	Medida simultânea de uma região angular finita de um padrão de difração para uso em estudos de cinética de transições de fase
	Medidas exploratórias com variação de pressão	Projetos futuros de equipar a linha com células de pressão
D11A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo (SAXS)	Remodelamento da câmara de altas temperaturas	Atingir temperaturas próximas de 1000C (ainda não foi possível)
	Projeto e construção de uma cápsula com janela de mica para amostras líquidas	Substituir os capilares de 1mm. A nova cápsula é adequada para pequenos volumes (~130 µl)
	Desenvolvimento de mini-garras para porta-amostras de filmes finos de polímeros	Possibilidade de rotacionar em 90 os filmes para estudo de estrutura planar
	Preparação de arranjo experimental com amostras em campos magnéticos de até 1 Tesla	As amostras podem ser acondicionadas em campos magnéticos com duas possíveis orientações e em temperaturas entre 5 e 90 graus

**Tabela 4: Melhoramentos nas linhas de luz (continuação)**

#### 1.4 – Implementar Novas Linhas de Luz

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

<b>Linhas de Luz</b>	<b>Monocromador</b>	<b>Aplicações</b>	<b>Status</b>
W01A: Wiggler multipolar para Cristalografia de Proteínas	Duplo-cristal focalizante	Biologia molecular estrutural usando a técnica MAD.	Fase final de construção
	6 – 15 keV		
D02A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo II	Cristal único focalizante	Vidros e nanocristais, polímeros, biologia molecular.	Em comissionamento
	6 – 12 keV		
D05B: Fluorescência UV para biologia	Espelhos para UV	Biologia molecular.	Em comissionamento
D08B: Espectroscopia de Absorção de Raios -X - II	Duplo-cristal focalizante	Ciências dos materiais; filmes finos e sistemas diluídos.	Fase final de construção
	4 – 15 keV		
U11: Ondulador para Espectroscopia VUV de alta resolução	Grade plana (PGM)	Superfície e interfaces; Física atômica e molecular; Dicroísmo circular magnético.	Construir/Projetar
	100 – 1200 eV		
D06B: Litografia de Raios-X (XRL)	Feixe branco filtrado	Em adaptação para novas aplicações.	Projetar
	5 - 20 KeV		

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



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**A. W01A: Cristalografia de macromoléculas II (MX2)**

A construção da nova linha de Cristalografia de Macromoléculas, que utilizará um *wiggler* como fonte de radiação, está quase concluída. Problemas com o projeto do sistema de refrigeração do primeiro espelho causaram um atraso na programação. Apesar disso, todos os outros componentes, incluindo o monocromador de cristal duplo (ver figura 1) e o segundo espelho, foram instalados com sucesso. Testes de *hardware* e *software* estão agora em um estágio avançado e a linha deverá estar pronta para comissionamento no primeiro semestre de 2006.

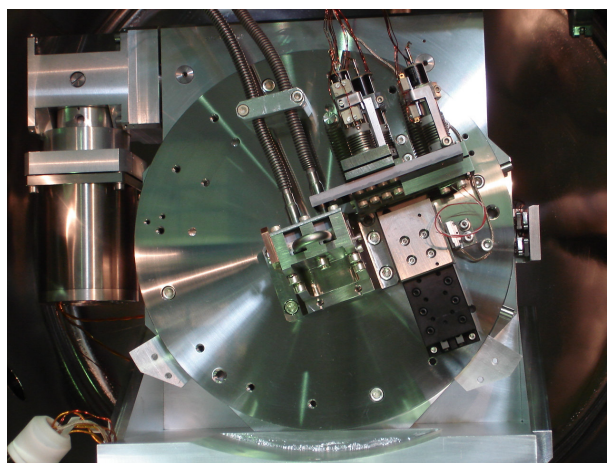


Figura 1: Monocromador de duplo cristal da MX2

**B. D02A: Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo II**

Em 2005 a instalação e comissionamento dos elementos óticos da linha SAXS-2 foram concluídos. O monocromador foi testado e o sistema ótico apresentou um funcionamento bastante eficiente, sendo capaz de sintonizar o feixe branco nos comprimentos de onda desejados entre 1.045 Å and 1.8 Å. O comissionamento da linha iniciou em maio de 2005. Foram realizados testes com amostras padrão (materiais sólidos porosos, fibras orientadas e macromoléculas em solução), utilizando um detector 1D, para avaliar o funcionamento do sistema de fendas, alinhamento e controle do feixe incidente na amostra. Como se pode ver nos dados apresentados na figura 2, o vetor de onda de espalhamento mínimo obtido ( $6 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ )

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

<sup>1)</sup> poderá ainda ser melhorado com a otimização do sistema de posicionamento do *beam-stop*.

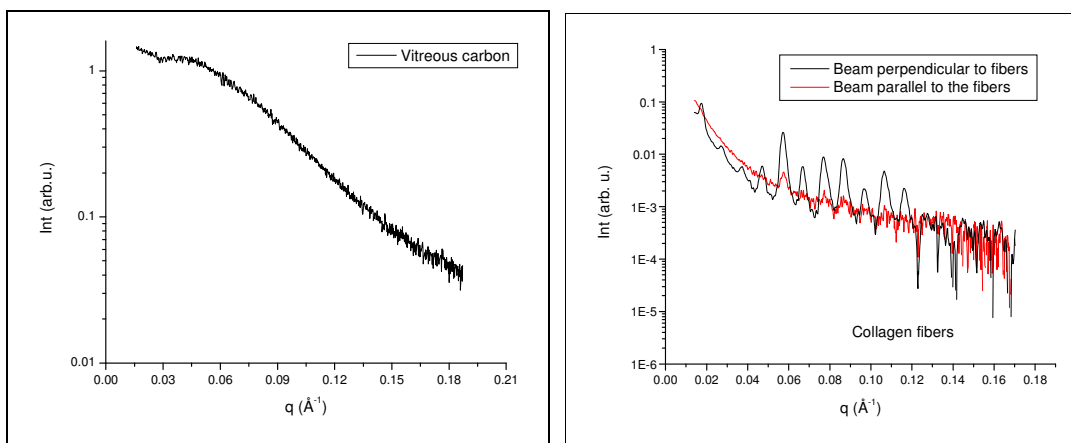


Figura 2: Experimentos feitos com amostras padrão, utilizando um detector linear sensível à posição (esquerda: amostra sólida, direita: fibras)

### C. D05B: Fluorescência UV para biologia

Após o término das instalações e condicionamento de vácuo da linha, ocorridos no primeiro semestre, os testes iniciais de operação revelaram dificuldades na realização das medidas, quando o anel se encontra em operação multipacotes convencional (este é o modo rotineiramente utilizado pelas linhas na maior parte do ano). Ainda que a operação da linha com realização de experimentos piloto tenha sido demonstrada com sucesso operando-se o anel em modo *single-bunch*, as dificuldades de operação no modo convencional representam um entrave grave para implementação da técnica e um esforço considerável foi aplicado ao longo do segundo semestre, envolvendo vários grupos da área de aceleradores, no sentido de compreender as origens das dificuldades enfrentadas pela linha assim como de propor soluções alternativas. Algumas das soluções tentadas envolveram mudanças na forma de operação do anel coma criação de modos *híbridos* capazes de satisfazer tanto as necessidades da linha VUVF quanto de outras linhas em alta corrente assim como o uso de moduladores ópticos (célula de *Pockels*). Os trabalhos neste sentido devem continuar no primeiro semestre de 2006.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**D. D08B: Espectroscopia de Absorção de Raios-X - II**

A linha XAFS-2 foi planejada com o objetivo de maximizar o fluxo de fótons disponíveis em um experimento típico. Um espelho de colimação vertical antes do monocromador e um espelho de focalização toroidal são algumas das características do seu projeto, que deverão resultar em um aumento de 50 a 100 vezes no fluxo de fótons. Até agosto de 2005 o projeto da linha foi concluído e a maior parte dos seus elementos óticos foram montados. Até novembro os principais testes de desempenho com o monocromador, goniômetro e *encoders* foram realizados. O comissionamento da linha com feixe iniciará no primeiro semestre de 2006.

**E. U11A: Espectroscopia VUV de alta resolução**

A construção desta linha passará por vários desafios técnicos sendo que quase todos os elementos desta complexa linha serão projetados, desenvolvidos e construídos pelos pesquisadores, engenheiros e corpo técnico do LNLS. Em 2005 o projeto e especificações técnicas da linha foram concluídos e o processo de compra dos 5 principais elementos óticos (espelhos e grades VLS) foi iniciado. A companhia Carls Zeiss está no momento fabricando os espelhos que deverão ser entregues no final de 2006. A maior parte das estações experimentais que se acoplarão esta linha já estão construídas ou em construção nas oficinas do LNLS. A figura 3 apresenta um esquema detalhado do projeto da linha.

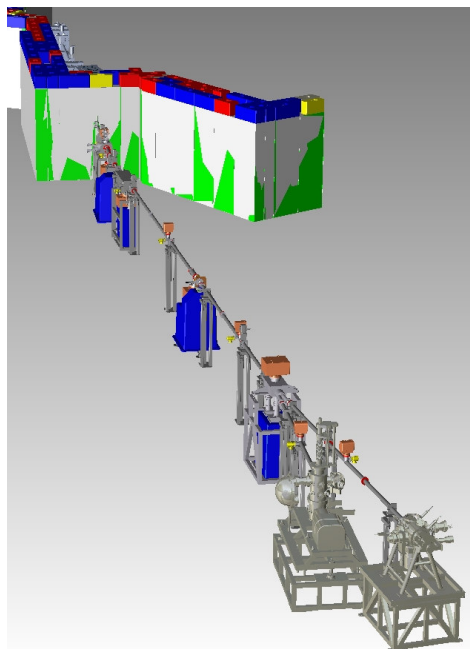


Figura 3: Projeto da nova linha de luz do ondulator, U11A, incluindo duas estações experimentais, para experimentos em ultra-alto vácuo e experimentos em fase gasosa.

#### **F. D06B: Litografia de raios-X (XRL)**

O projeto de modificações da linha XRL tem como objetivo a adequação para realização de experimentos de mapeamento de aminoácidos em proteínas por radiólise da água por raios-X. Nesse projeto estão previstas modificações em alguns elementos da linha atual, a atualização do sistema de inter-travamento, a construção de uma cabana e a adequação do carrinho de movimentação para um porta-amostras. Até o mês de abril de 2006 essas modificações devem ser concluídas, dando-se então início ao comissionamento.

#### **1.5 – Uso das Linhas de Luz**

Durante 2005 foram realizadas 423 propostas de pesquisas, por mais de 790 pesquisadores usuários (responsáveis e colaboradores) utilizando as instalações das linhas de luz.

A evolução histórica da quantidade de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 2001 e sua distribuição geográfica, pode ser observada na tabela 6. Notamos uma tendência nos dois últimos anos de um aumento da participação dos

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS  
Relatório Anual de 2005**

outros estados brasileiros na utilização da fonte de luz síncrotron. Ainda é cedo, no entanto, para que esta tendência seja consolidada.

Origem	2001		2002		2003		2004		2005	
São Paulo	112	62%	138	60%	223	62%	216	57%	216	51%
Outros estados	42	23%	59	26%	82	23%	107	28%	134	32%
Outros países	27	15%	34	14%	53	15%	56	15%	73	17%
<b>Total</b>	<b>181</b>		<b>231</b>		<b>358</b>		<b>379</b>		<b>423</b>	

**Tabela 6: Distribuição geográfica das propostas de pesquisas realizadas**

A distribuição das propostas de pesquisas realizadas durante o ano de 2005 por linha de luz pode ser observada na tabela 7. A Argentina continua sendo o parceiro estrangeiro mais importante, responsável por mais de 10% das propostas realizadas.

Linha (2005)	MX1	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPB	Total
<b>Total realizado nas Linhas</b>	<b>95</b>	<b>57</b>	<b>94</b>	<b>27</b>	<b>21</b>	<b>11</b>	<b>15</b>	<b>12</b>	<b>20</b>	<b>41</b>	<b>30</b>	<b>423</b>
<b>Por país:</b>												
Brasil	90	46	78	20	19	9	13	8	17	30	20	<b>350</b>
Outros	5	11	16	7	2	2	2	4	3	11	10	<b>73</b>
<b>Total</b>	<b>95</b>	<b>57</b>	<b>94</b>	<b>27</b>	<b>21</b>	<b>11</b>	<b>15</b>	<b>12</b>	<b>20</b>	<b>41</b>	<b>30</b>	<b>423</b>
Linha (2005)	MX1	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPB	Total
<b>Total realizado nas Linhas</b>	<b>95</b>	<b>57</b>	<b>94</b>	<b>27</b>	<b>21</b>	<b>11</b>	<b>15</b>	<b>12</b>	<b>20</b>	<b>41</b>	<b>30</b>	<b>423</b>
<b>Por país:</b>												
Brasil	90	46	78	20	19	9	13	8	17	30	20	<b>350</b>
Argentina	5	10	14	4		1	2	3	3	8	4	<b>54</b>
Cuba				2							4	<b>6</b>
África do Sul			1		1						1	<b>3</b>
Estados Unidos da América				1						1		<b>2</b>
França						1		1				<b>2</b>
Bélgica					1							<b>1</b>
Alemanha		1										<b>1</b>
Chile										1		<b>1</b>
México											1	<b>1</b>
Noruega			1									<b>1</b>
Venezuela										1		<b>1</b>
<b>Total</b>	<b>95</b>	<b>57</b>	<b>94</b>	<b>27</b>	<b>21</b>	<b>11</b>	<b>15</b>	<b>12</b>	<b>20</b>	<b>41</b>	<b>30</b>	<b>423</b>

**Tabela 7: Propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Por estado / instituição brasileira:	MX1	XAS	SAS	XD-1	XD-2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPB	Total
<b>Brasília</b>												
UnB	1	2	1	1							2	7
<b>Ceará</b>												
UFCE	15	1		1				1	2			20
<b>Espírito Santo</b>												
UFES									2			2
<b>Minas Gerais</b>												
UFMG		3	3	4	2			1			2	15
EFOA											1	1
UFV					1							1
<b>Pará</b>												
UFPA				1								1
<b>Paraíba</b>												
UFPB		1										1
<b>Paraná</b>												
UFPR		2			4	1					2	9
UEOP										2		2
UEM				1								1
<b>Pernambuco</b>												
UFPE				1								1
<b>Rio de Janeiro</b>												
UFRJ		3	11		1	2	4		1	7		29
CBPF		1				1			1	3	1	7
IME		1	1					1				3
UERJ				1						2		3
CEPEL											1	1
FIOcruz			1									1
PUC							1					1
UFF											1	1
<b>Rio Grande do Norte</b>												
UFRN		1							1			2
<b>Rio Grande do Sul</b>												
UFRGS	1	5	7						2	1		16
UCS		1									2	3
<b>Santa Catarina</b>												
UFSC		1	1	1			1	1	1			6
<b>São Paulo</b>												
LNLS	13	6	5	2	1	3	6	2	5	1	3	47
UNICAMP	2	5	8	6	8				1	8	4	42
USP - São Paulo	15	3	8		2	1	1	1		3		34
USP - São Carlos	6	4	15	2		1			1	1		30
UNESP - São José Rio Preto	21		3									24
UNESP - Botucatu	13											13
UFSCar		4	6									10
UNESP - Araraquara	1	2	6									9
USP - Ribeirão Preto	1								2			3
IPEN			1								1	2
UNESP - Rio Claro			1									1
Universidade de Mogi das Cruzes	1											1
<b>Total Geral</b>	<b>90</b>	<b>46</b>	<b>78</b>	<b>21</b>	<b>19</b>	<b>9</b>	<b>13</b>	<b>7</b>	<b>17</b>	<b>30</b>	<b>20</b>	<b>350</b>

Tabela 7: Propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz (continuação)

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

A tabela 7 demonstra a utilização das linhas de luz por estado e por instituição de pesquisa. Os dados demonstram o resultado esperado, isto é, as instituições mais tradicionais de pesquisa – USP, UNICAMP, UFRJ, UFRGS, UFMG – têm a maior participação no uso das instalações. Destacamos a forte presença da UFCE na linha MX1, resultado dos trabalhos da Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural. Por outro lado, com exceção deste caso, os outros estados ainda não tiveram uma participação mais efetiva nesta Rede, conseqüência da dificuldade nos trabalhos de cristalização das proteínas.

A evolução histórica do número de propostas de pesquisas realizadas nas linhas de luz desde 2000 e sua distribuição geográfica, pode ser observada no gráfico 3. O resumo dos principais parâmetros de uso e evolução da infra-estrutura relacionada a *P, D&I* com a luz síncrotron pode ser observada na tabela 8. O número de propostas realizadas continua crescendo. Historicamente, o salto mais significativo ocorre entre 2002 e 2003. As razões para isto estão no aumento do número de linhas de luz e no aumento do número de horas de linhas de luz obtido com o início da operação de 24 horas (efetivamente 22 horas de feixe mais o tempo de injeção). A linha de luz XRL foi fechada em 2004. Isto, no entanto, não alterou a estatística uma vez que a utilização desta linha de luz era e sempre foi marginal.



Gráfico 3: Evolução do número de pesquisas realizadas nas linhas de luz.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

	<b>2001</b>	<b>2002</b>	<b>2003</b>	<b>2004</b>	<b>2005</b>
Projetos	181	231	358	379	423
Horas de Linhas	23.420	32.980	40.533	39.909	38.651
Confiabilidade	95%	96%	98%	93%	94%
Linhas de Luz em operação	10	10	11	12	11
Linhas de Luz em manutenção	-	-	-	-	1
Novas Linhas de Luz em instalação ou comissionamento	-	1	1	2	4

**Tabela 8: Principais parâmetros de uso das linhas de luz.**



## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

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

A infra-estrutura de pesquisa em micro e nanotecnologias do LNLS esteve composta pelos seguintes laboratórios e/ou grupos:

Lab. de Síntese Química de Nanopartículas (LSQ);

Lab. de Filmes Finos (LFF);

Laboratório de Microfabricação (LMF);

Laboratório de Microscopia Eletrônica (LME);

Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento (MTA);

Grupo de Teoria (TEO).

Os dois primeiros estão dedicados à síntese de materiais, etapa inicial e fundamental de toda a pesquisa em micro e nanotecnologias. O terceiro está concentrado no processamento dos microsistemas. Os dois seguintes concentram-se na caracterização e análise dos micro e nanosistemas. Finalmente, o último grupo oferece o apoio teórico para os trabalhos experimentais realizados.

#### **2.1 – Manutenção e Melhoramentos da Infra-estrutura**

A infra-estrutura de pesquisa em micro e nanotecnologia foi mantida operacional durante todo o ano de 2005. A infra-estrutura aberta está sintetizada nas seguintes instalações:

- Microscópio eletrônico de varredura de baixo vácuo (SEM JEM-LV-5900)
- Microscópio eletrônico de varredura por emissão de campo (FEG-SEM JEM-6330F)
- Microscópio eletrônico de transmissão de alta-resolução (HRTEM JEM-3010)
- Microscópio de varredura por tunelamento (STM-UHV)
- Microscópio de varredura por força atômica (AFM)
- Laboratório de microfabricação

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

Além destas, as seguintes instalações são mantidas para a pesquisa interna e para o desenvolvimento de projetos industriais:

- Laboratório de síntese química de nanopartículas
- Laboratório de síntese de filmes finos
- Laboratório de caracterização óptica de semicondutores
- Equipamento para espectroscopia de fotoelétrons ejetados (XPS)
- Difratorômetro convencional de raios-X

Em 2005, foi instalado no SEM-LV um novo sistema para espectroscopia de raios-X (*EDS, Thermo SIX-III Spectral Imagin System*, detector de Si(Li) 10 mm<sup>2</sup>, de resolução de energia no Mn de 129 eV, janela ultra-fina *Norvar*). Este sistema permite microanálise quantitativa e mapeamento químico quantitativo das amostras. Foi também instalado um sistema para difração de elétrons retro-espalhados (*HKL EBSD Channel 5 System*). Este sistema permite a análise de texturas, mapeamento de deformações e orientações cristalográficas. Ainda no SEM-LV, foi desenvolvido um procedimento especial para automatizar as medidas de inclusões não-metálicas em aços, desenvolvimento realizado inicialmente para atender a um projeto industrial mas que tem aplicações em vários outros projetos.

No FEG-SEM foi instalado um sistema de espectroscopia de raios-X (*EDS, Noran Voyager*, detector de Si(Li) 10 mm<sup>2</sup>, resolução de energia no Mn de 138 eV, janela ultra-fina *Norvar*) utilizando a eletrônica do sistema antigo do SEM-LV e um novo detector. Este sistema já foi comissionado e começa a ser utilizado pelos usuários. A instalação da eletrônica que permitirá o controle externo do feixe encontra-se na fase final. Um anti-contaminador baseado em um sistema de plasma de oxigênio (*Evactron*) foi instalado permitindo a limpeza das amostras dentro do microscópio, procedimento muitas vezes necessário para observações em altos aumentos (x 500.000). Um detector anular de elétrons transmitidos em campo escuro foi desenvolvido e posto em operação e já está em uso pelos usuários, permitindo obter significativa melhora na resolução do microscópio.

No HRTEM foram trocadas as aberturas críticas para manter a melhor resolução possível. Além disso, a câmera CCD demonstrou fadiga e foi enviada aos EUA para reparos, o que resultou em um período de três meses de utilização do microscópio

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS** **Relatório Anual de 2005**

através da revelação de filmes. Finalmente, o porta-amostra apresentou problemas na sua articulação de safira e encontra-se nos EUA para reparos.

Foram adquiridos novos equipamentos para a preparação de amostras para a microscopia eletrônica: um sistema de polimento ultra-fino por vibração (VIBROMET-2), necessário para preparar amostras para o EBSD e uma máquina de corte com disco de diamante de alta velocidade (ISOMET 4000), necessário para a preparação de amostras metálicas e cerâmicas para o TEM.

Um novo sistema de microscopia de força atômica (AFM) foi adquirido utilizando fundos do CNPq em conjunto com um projeto industrial. Este novo sistema de AFM tem como objetivos compartilhar a demanda de uso do AFM existente, sendo que este instrumento apresenta as seguintes características: a) “loop” fechado equivalente – permite que se tenha um posicionamento global da ponta com relação à amostra, com isto possibilitando litografia, b) sistema de medidas de potencial de contato – *Kelvin Probe microscopy*, e c) sistema de medidas de capacitância – *Scanning capacitance microscopy*. Estas novas formas de microscopias estarão disponíveis para os usuários após comissionamento do equipamento.

As infra-estruturas do LMF e do LFF foram totalmente reformuladas. Foram substituídos o forro dos dois laboratórios e reformados os dutos e filtros de ar condicionado. Esta reforma permitiu um aumento na qualidade do ar fornecido à sala de fotografação. Com recursos provenientes do projeto de modernização de infraestrutura laboratorial da FINEP foi realizado um conjunto de obras para a adequação do laboratório à demanda atual. Foram adquiridos novos fluxos laminares, capelas químicas, adequação do piso e iluminação da sala de fotografação, substituição de divisórias, armário para produtos químicos. Os procedimentos de segurança do LFF foram redigidos e encontram-se em análise para posterior abertura do laboratório aos usuários externos.

O Laboratório de Síntese Química de Nanopartículas (LSQ) passou a coordenar em 2005 projetos industriais na área de catálise. Dentro do convênio LNLS-GETEC, foram instalados um equipamento para medidas de fisorção e quimisorção para medidas de rotina de área superficial, distribuição de poros e área metálica dos catalisadores Ni-Raney e um reator de hidrogenação, que permite realizar as reações para fabricação de sorbitol. Um outro ponto importante para esses projetos industriais foi a aquisição de um analisador de elétrons e montagem de um sistema para medidas de Espectroscopia de Fotoelétrons Ejetados (XPS). Esse equipamento

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

encontra-se na fase final de instalação e caracterização e medidas de XPS de interesse de três convênios industriais já foram obtidas. Uma equipe dedicada aos projetos industriais na área de catálise está sendo consolidada.

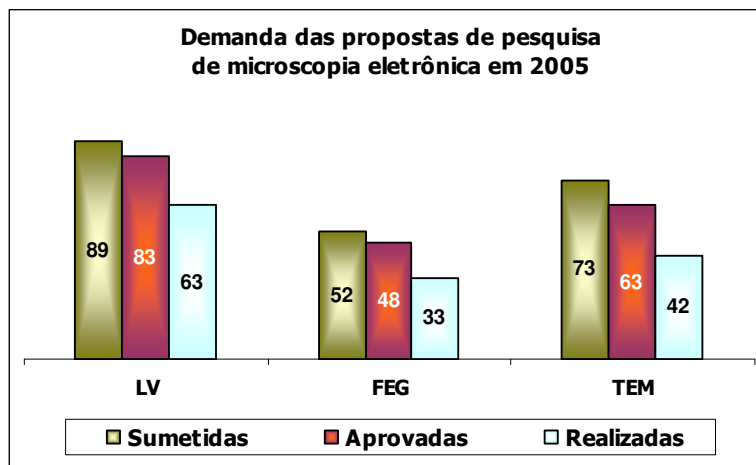
Com relação a infra-estrutura relacionada à pesquisa acadêmica, já está em funcionamento uma cuba de *Langmuir-Blodgett* que vem sendo utilizada para a fabricação de monocamadas de nanopartículas coloidais. Um sistema de exaustão dedicado foi instalado para realização dos experimentos.

Finalmente, foi aprovado e contratado junto à FINEP um projeto com recursos para a ampliação da infra-estrutura de pesquisa voltada à nanociência e a nanotecnologia. Estes recursos prevêem a construção do prédio César Lattes que abrigará os novos microscópios eletrônicos e novas instalações científicas. Foi contratada uma firma de Projeto para projetar o prédio César Lattes e também uma firma de Engenharia para detalhar o projeto. A construção do prédio está prevista para 2006 sendo que está prevista a instalação dos novos microscópios no segundo semestre de 2006. A segunda parte dos recursos serão utilizados para a aquisição do terceiro dispositivo de inserção, um *wiggler* para ciências dos materiais.

### **2.2 - Apoio aos Pesquisadores-Usuários**

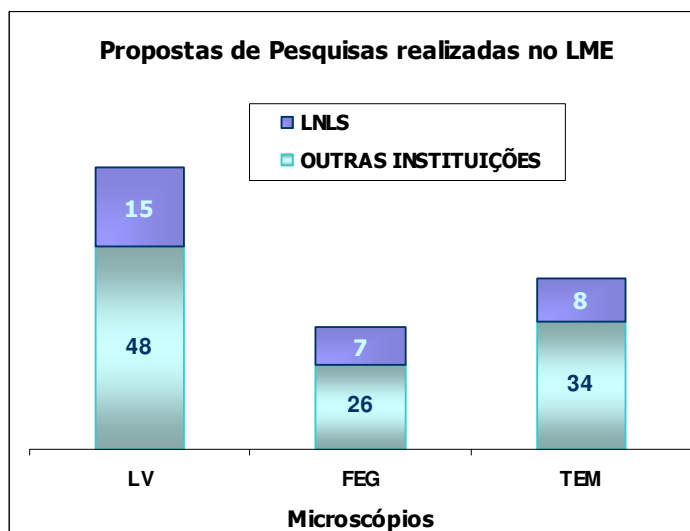
Em 2005 foram submetidas 214 propostas de pesquisa, das quais 194 foram avaliadas como viáveis tecnicamente. Destas, 138 propostas foram realizadas sendo que as restantes não foram executadas por opção do usuário que não agendou o experimento. Este acompanhamento é possível hoje com o agendamento eletrônico, que tem permitido uma utilização mais racional do tempo dos microscópios. A comparação do número de propostas com os anos anteriores deve levar em conta que até o ano passado a estatística era realizada em relação às propostas aprovadas; a partir deste ano esta estatística será feita em relação às propostas executadas.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**



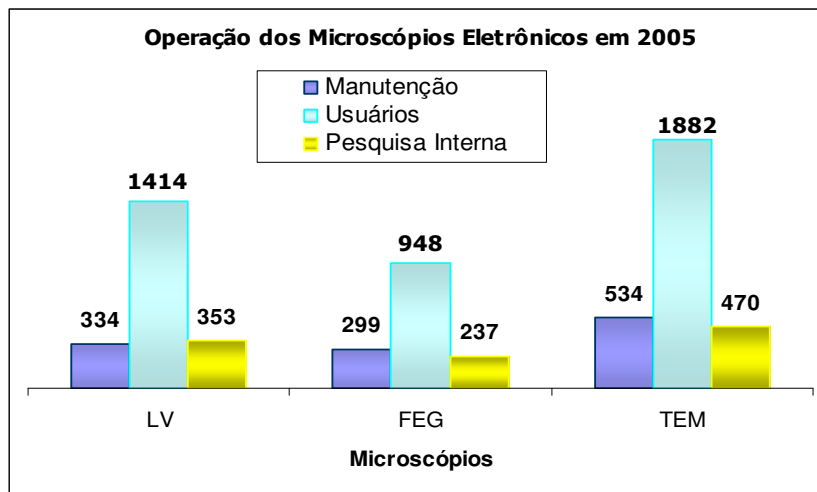
**Gráfico 4: Demanda de propostas de pesquisas no LME**

No gráfico 5 aparece a distribuição de propostas em relação a usuários por microscópio. Observamos que os usuários externos dominam a utilização dos microscópios, demonstrando efetivamente o caráter de centro nacional do laboratório de microscopia eletrônica. É importante lembrar que deve haver um aumento dos projetos industriais nos próximos anos, uma vez que uma parte considerável dos projetos de desenvolvimento tecnológico realizados com a indústria requer a utilização da microscopia eletrônica e esta demanda tem crescido nos últimos anos.



**Gráfico 5: Distribuição das propostas de pesquisas submetidas no LME em 2005.**

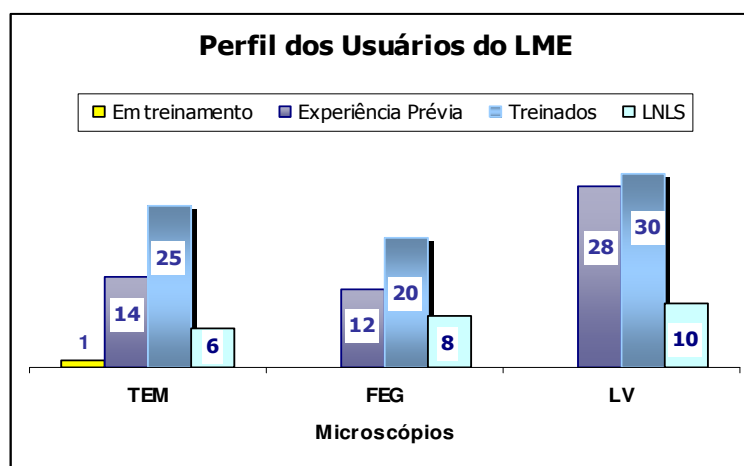
**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**



**Gráfico 6: Operação dos microscópios eletrônicos em 2005 (horas)**

O gráfico 6 apresenta o tempo de utilização dos microscópios, onde podemos observar a saturação na utilização do TEM enquanto que o LV e o FEG ainda dispõe de alguma capacidade de expansão de uso. É importante que esta utilização está baseada em um uso médio de horas de cada microscópio (TEM funciona 12 horas/dia, o LV funciona 10 horas/dia e o FEG funciona 8 horas/dia) por dia. Notamos também que o tempo de manutenção tem sido significativo, em particular para o TEM.

Finalmente, o Gráfico 7 mostra o perfil dos usuários. Neste período, o Laboratório de Microscopia Eletrônica recebeu 154 usuários, dos quais 130 externos. Foram treinados 75 usuários, ampliando a comunidade capacitada para a utilização destes equipamentos.



**Gráfico 7: Perfil dos usuários do LME em 2005.**

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

A disponibilidade do microscópio AFM do LNLS visa atender uma demanda de pesquisadores incipientes na área como também de grupos que utilizam as outras instalações do LNLS e necessitam de AFM e outras técnicas de varredura de pontas para complementarem seus trabalhos. Em 2005, o AFM teve a submissão de 19 projetos. Há necessidade de uma avaliação sobre esta atividade e como ela pode ser desenvolvida para melhor atender a comunidade, tendo em vista que este tipo de equipamento é bastante difundido nos laboratórios de pesquisa universitários.

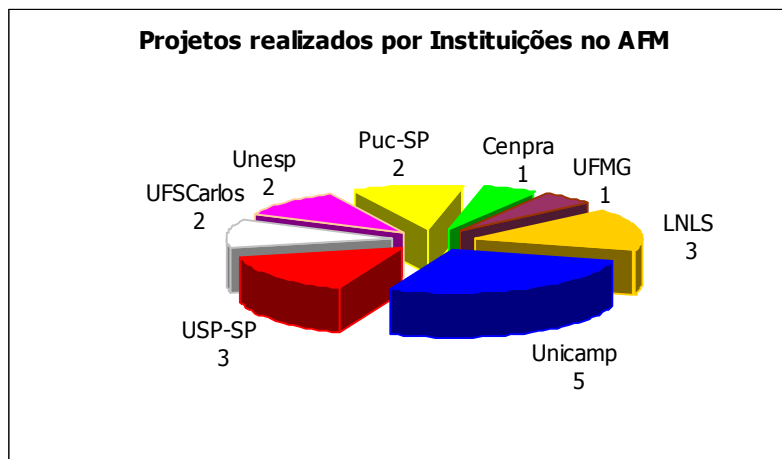
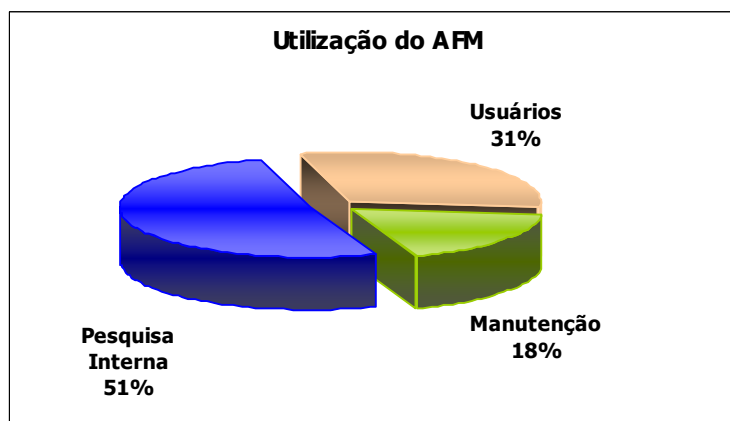


Gráfico 8: Origem dos usuários do AFM



O gráfico 9: Utilização do AFM durante o ano de 2005.

O gráfico 8 apresenta a distribuição dos projetos por instituições, onde observamos a presença de pesquisadores das principais instituições de pesquisa da região. No gráfico 9 apresenta a distribuição do tempo por origem dos usuários. Deve-se observar que na pesquisa interna estão incluídos os projetos relacionados à indústria. Ressalta-se também o tempo de manutenção em 2005. Os problemas com

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

o microscópio exigiram um período de manutenção de 3 semanas. Além disto, obras de melhoria no laboratório impediram uma utilização maior do equipamento. Finalmente, observamos uma crescente demanda interna por tempo de experimento, enquanto que pelos usuários externos o número de projetos continua grande.

No LMF foram desenvolvidas 19 propostas por usuários externos. Houve uma crescente demanda dos projetos de pesquisa internos e projetos de desenvolvimento junto às indústrias, ampliando a participação relativa do laboratório nas suas atividades de apoio. O número de horas de projetos externos executados foi de 1800 horas comparado a 1660 horas em 2004. É importante salientar que os projetos permanecem em atividade durante um ano, sendo realizadas várias visitas de pesquisa por projeto. Alguns projetos têm atingido mais de 100 horas de duração, permitindo um treinamento mais aprofundado dos usuários.

A distribuição dos usuários encontram-se no gráfico 10, onde observamos significativa utilização por parte dos usuários externos em relação à 2004 e a participação da indústria no LMF (ver programa 5).

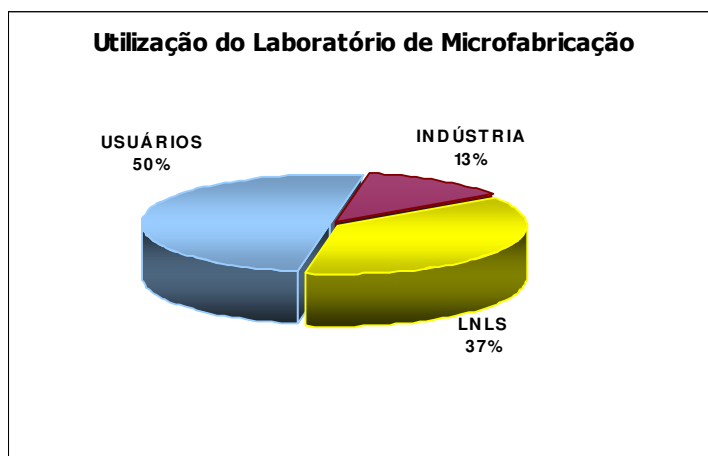


Gráfico 10: Distribuição por tempo de uso do LMF em 2005.

O Laboratório de Filmes Finos (LFF) foi utilizado por usuários internos, produzindo amostras para diversas finalidades de pesquisa e/ou aplicações. Os procedimentos de segurança para os trabalhos de usuários externos foram estabelecidos e estão em análise. A liberação do laboratório para usuários deve ocorrer no primeiro semestre de 2006.

Com relação ao LSQ, o principal apoio realizado foi quanto a usuários externos industriais que têm interesse no uso das instalações do LNLS. Em particular, o



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

CENPES-Petrobras adquiriu tempo de feixe na linha de luz XAFS1 para a realização de projetos de interesse industrial.

O Grupo de Teoria mantém forte atividade de apoio aos grupos e usuários experimentais, buscando auxiliar a interpretação dos resultados através de modelos teóricos, na maior parte das vezes com forte componente fenomenológica. Um projeto recém-doutor foi aprovado e deve iniciar em 2006 visando ampliar a capacidade do grupo para a modelagem teórica. No final de 2005, o grupo assumiu a responsabilidade pela parte científica de um projeto de prospecção de semicondutores orgânicos envolvendo o setor privado com o objetivo de analisar a viabilidade do desenvolvimento tecnológico e industrial destes componentes no Brasil.

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

Este programa engloba as atividades desenvolvidas na área de Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia pelo Centro de Biologia Molecular Estrutural (CeBiME), as quais envolvem o fornecimento de infra-estrutura, a coordenação de programas de pesquisa em rede e a realização de projetos científicos.

#### **3.1 - Manutenção e melhoria da infra-estrutura de pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e em Biotecnologia**

Os investimentos em infra-estrutura visando consolidar as instalações do CeBiME para pesquisa avançada em Biologia Molecular Estrutural incluíram vários itens adquiridos e outros em fase de aquisição e instalação. Para o Laboratório de Biologia Molecular foram adquiridos um aparelho de PCR em tempo real e um fermentador visando a análise quantitativa da expressão gênica e a produção de proteínas recombinantes em larga escala, respectivamente, com recursos do programa SMoIBNet da FAPESP.

A instalação da segunda linha de cristalografia, linha MX2, que permitirá a utilização da técnica MAD (*Multiple-wavelength Anomalous Diffraction* = difração anômala a múltiplos comprimentos de onda), está com o cronograma de instalação atrasado. Para equipar a linha foi adquirido um sistema criogênico baseado em nitrogênio para resfriamento de cristais, também com recursos do programa SMoIBNet da FAPESP. Um detector CCD de alta resolução que permitirá coleta de dados de difração até uma resolução próxima a 1 Å na futura linha MX2 foi adquirido através de um projeto multi-usuário da FAPESP devendo ser instalado até março de 2006. O comissionamento da linha de fluorescência está com o cronograma atrasado devido a problemas conceituais no projeto original. Medidas estão sendo tomadas para solucionar as dificuldades encontradas e comissionar a linha de luz.

Também no início de 2005 foi formalizada a aquisição da sonda criogênica para o espectrômetro de ressonância magnética nuclear de 600 MHz, com recursos do programa CEPID-FAPESP, a qual será instalada em Março de 2006. A sonda criogênica permitirá maior sensibilidade ao aparelho durante a aquisição de dados.

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

Neste período foi traçado um plano de otimização do CeBiME para os setores de Cristalografia e Espectroscopia de Macromoléculas e o Laboratório de Biologia Molecular. No caso de Cristalografia e Espectroscopia de Macromoléculas, o plano inclui a implantação de dois robôs para automação do processo de preparo de soluções e para os ensaios de cristalização de proteínas, os quais já foram adquiridos em 2005 e deverão ser recebidos e instalados no início de 2006, com recursos do programa SMoIBNet da FAPESP e da ReNaBiME do CNPq, respectivamente. Este plano envolve também a futura aquisição de uma fonte de raios-X (anodo rotatório) cujos recursos já foram concedidos pela FAPESP através do programa SMoIBNet. Os laboratórios serão remodelados para adequação aos robôs e também para a construção de uma segunda câmara de cristalização com temperatura de 18°C. A implementação deste plano deve ser finalizada em 2006 conferindo ao CeBiME uma infra-estrutura para a resolução de estruturas de proteínas que permitirá tanto aumentar o número de usuários como executar projetos de escala maior. Para o Laboratório de Biologia Molecular o plano envolve a aquisição e instalação de um sistema de análise de micro-chips de DNA para análise de expressão gênica em larga escala e de um novo aparelho para sequenciamento de DNA, ambos com recursos da FAPESP através do programa SMoIBNet. Com estas melhorias o Laboratório de Biologia Molecular terá condições de identificar as proteínas de maior interesse para estudos estruturais e funcionais.

### **3.2 - Apoiar pesquisadores externos com a infra-estrutura de pesquisa em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia**

O apoio é oferecido na forma de programas em rede e de instalações abertas.

#### **3.2.1 – Rede Nacional de Biologia Estrutural**

A rede operou regularmente com visitas contínuas de usuários com projetos ligados às redes. Nove usuários da rede nacional desenvolveram trabalhos no CeBiME: David Neves, Meire Lima, Gisele F. Esteves, Humberto A Almeida Fo., Sonia M. Freitas (UNB); Dirce Ferreira Luz (UFV); Rafael Guerra (UFRGS); Paula C. Pohl, Willy Jablonka (UFRJ). Esta rede se encerra no final de janeiro de 2006.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**3.2.2 – Rede de Biologia Estrutural do Estado de São Paulo**

A rede SMoIBNet entrou no seu quinto ano, uma fase onde a maioria dos grupos está com proteínas cristalizadas e dados de difração ou de RMN sendo analisados. Os dados científicos da SMoIBNet estão depositados num banco de dados no LNLS (BDNet) criado para uso dos membros do programa. Um resumo dos dados alcançados está na tabela 9. Um total de 425 proteínas alvos foram selecionadas para estudos estruturais ao longo dos cinco anos do programa. Dentre estas, 196 foram purificadas e 53 foram cristalizadas e outras 17 formaram micro-cristais. 42 proteínas tiveram suas estruturas tri-dimensionais resolvidas ou estão em fase de resolução, 36 estruturas foram resolvidas por cristalografia (pelo menos 3 proteínas foram resolvidas em diferentes estados ou com diferentes ligantes) e 6 por ressonância magnética nuclear. O número de usuários do programa SMoIBNet no período foi de 33 tendo sido registrados um total de 383 períodos no sistema de acompanhamento do LNLS.

Group	Target	Expression Vectors	Expression Assays	Purification Assays	<sup>1</sup> Purified proteins	Cristalization Assays	X-Ray data	<sup>1</sup> Crystal Structure	RMN data collection	<sup>1</sup> RMN Structure
DSouza	7	11	10	12	4	7	0	0	0	0
HDorry	12	16	17	16	9	9	0	0	1	0
ICendes	21	40	54	21	7	2	0	0	0	0
ISilva	8	10	18	12	3	3	0	0	0	0
LFerreira	21	37	25	18	8	13	3	1	0	0
LNetto	15	16	16	14	11	47	20	6	0	0
MMenossi	16	27	30	15	8	3	0	0	0	0
RAraujo	10	9	5	6	4	4	2	1	5	1
MFontes (RLarson)*	14	16	16	16	7	23	17	10	0	0

**Tabela 9: Resumo dos dados depositados no banco da SMoIBNet (BDNet) sobre o número e o estágio das proteínas em estudo.**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

SSchenkman	40	70	69	65	23	25	7	4	8	3
SValentini	35	56	43	42	19	37	1	0	0	0
CFarah	14	10	7	8	8	4	4	2	13	5
ASouza (TYano)	28	37	34	19	13	5	2	1	1	0
WAzevedo*	4	2	2	2	2	1	2	2	0	0
WTerra	15	14	10	9	6	8	2	1	0	0
ASpisi	2	0	0	0	0	0	0	0	2	2
BGuimarães	30	32	40	10	10	7	6	1	0	0
CRamos	14	11	11	9	9	4	0	0	2	0
CBenedetti	23	28	22	17	10	7	4	1	4	1
FMartin	23	20	6	2	2	1	1	1	0	0
JBarbosa	13	24	5	5	5	4	4	2	0	0
JKobarg	20	32	24	13	7	8	0	0	0	0
NZanchin	34	32	36	40	21	18	8	3	0	0
Total 2005	419	550	500	371	196	240	83	36	21 proteínas 15 peptides	6 proteínas 6peptides
Total 2004	364	452	374	299	114	184	68	26		

**Tabela 9: Resumo dos dados depositados no banco da SMOIBNet (BDNet) sobre o número e o estágio das proteínas em estudo. (continuação)**

**1, os números destas colunas correspondem a alvos de proteínas simples, proteínas cristalizadas em diferentes estados ou com diferentes ligantes.**

**\* dados atualizados em outubro de 2005**

Os 383 períodos de experimentos dos usuários da SMOIBNet registrados no sistema de acompanhamento do LMLS, pode ser observada na tabela a seguir:

<b>Usuário</b>	<b>Instituição</b>	<b>Coordenador da Rede</b>	<b>Instalação no CeBiME</b>	<b>Nº Dias</b>
Anderson Sola de Haro	UMC	Ronaldo de C. Araújo	Laboratório de Cristalização	2
Andrea B. Fernandes	USP	Luís Carlos Ferreira	Laboratório de Cristalização	4
Antonio M. Saraiva	UNICAMP	Tomomasa Yano	Lab. de Espectroscopia	1
Camila Arnaldo Olhe	UNESP	Sandro Valentini	Laboratório de Cristalização	16
Carolina S. Pérez	USP	Luís Carlos Ferreira	Lab. de Espectroscopia	2
			Laboratório de Cristalização	2
Celso Romero Ramos	USP	Hamza F. El-Dorry	Laboratório de Cristalização	14
Cleide Ferreira Catani	UNICAMP	Tomomasa Yano	Laboratório de Cristalização	51

**Tabela 10: Resumo dos períodos de experimentos dos Usuários da SMOIBNet**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Cristiane R. Guzzo	USP	Shaker Chuck Farah	Laboratório de Cristalização	1
Cristiane S. de Souza	USP	Luís Carlos Ferreira	Lab. de Espectroscopia	2
			Laboratório de Cristalização	8
Dilaine R. S. Schneider	UNICAMP	Tomomasa Yano	Lab. de Espectroscopia	2
Ecaue Pereira da Costa	UMC	Ronaldo de C. Araújo	Laboratório de Cristalização	9
Eduardo Hilario	UNESP	Sandro Valentini	Laboratório de Cristalização	13
Eduardo H. Nakamatsu	USP	Luís Carlos Ferreira	Lab. de Espectroscopia	1
Fabiane C. Caçado	USP	Walter Ribeiro Terra	Laboratório de Cristalização	25
Fabiano T.de Araújo	USP	Luís Carlos Ferreira	Laboratório de Cristalização	26
Felipe Chambergo A.	USP	Hamza F. El-Dorry	Lab. Ressonância Magnética Nuclear	2
Fernando Corrêa	USP	Shaker Chuck Farah	Lab. de Espectroscopia	1
Fernando Ariel Genta	USP	Walter Ribeiro Terra	Laboratório de Cristalização	3
Ivan Torres N. Campos	UNIFESP	Sérgio Schenkman	Laboratório de Cristalização	10
José Sérgio M. Soares	UNICAMP	Tomomasa Yano	Lab. de Espectroscopia	5
Júlio César Borges	UNESP	Walter F. Azevedo Jr.	Lab. de Espectroscopia	13
Luciana Kauer Rosselli	UNICAMP	Tomomasa Yano	Lab. Ressonância Magnética Nuclear	14
M. Carolina S.Jimenez	UNIFESP	Sérgio Schenkman	Laboratório de Cristalização	18
M.Carolina S. Moraes	UNIFESP	Sérgio Schenkman	Lab. Ressonância Magnética Nuclear	1
M.Cristina Garcia	UNICAMP	Íscia T. Lopes Cendes	Laboratório de Biologia Molecular	18
Regina Affonso	UNIFESP	Ismael D. C. G. da Silva	Laboratório de Cristalização	3
			Lab. de Espectroscopia	5
Ronaldo de C. Araujo	UMC	Ronaldo de C. Araújo	Laboratório de Cristalização	1
Sandro Marana	USP	Walter Ribeiro Terra	Lab. Ressonância Magnética Nuclear	1
Shaker Chuck Farah	USP	Shaker Chuck Farah	Lab. Ressonância Magnética Nuclear	35
Susely Ferraz de Siqueira Tada	UNICAMP	Anete P. Souza/ Tomomasa Yano	Laboratório de Cristalização	19
Tatiany Cristina Marques	UNICAMP	Íscia Teresinha Lopes Cendes	Laboratório de Cristalização; Laboratório de Biologia Molecular	37
Veridiana S .P. Cano	UNESP	Sandro Valentini	Laboratório de Cristalização	6
Victor Genu Faria	USP	Luís E. Soares Netto	Laboratório de Cristalização	11

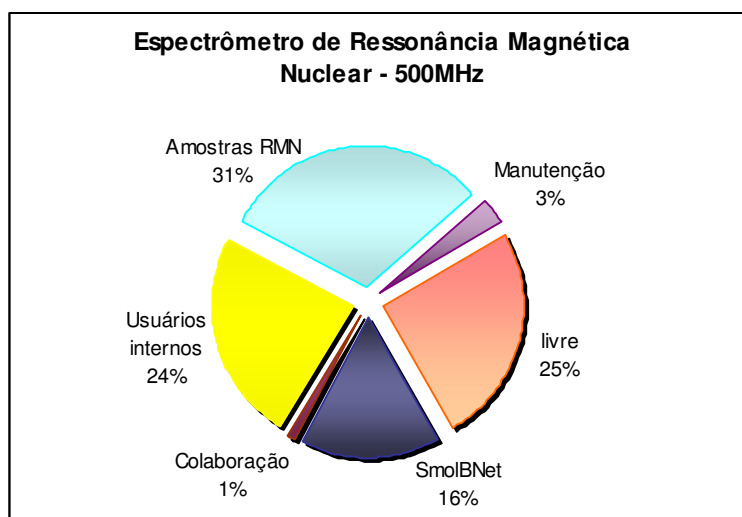
**Tabela 10: Resumo dos períodos de experimentos dos Usuários da SMolBNet (continuação)**

### **3.2.3 – Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear - instalação aberta, multi-usuária**

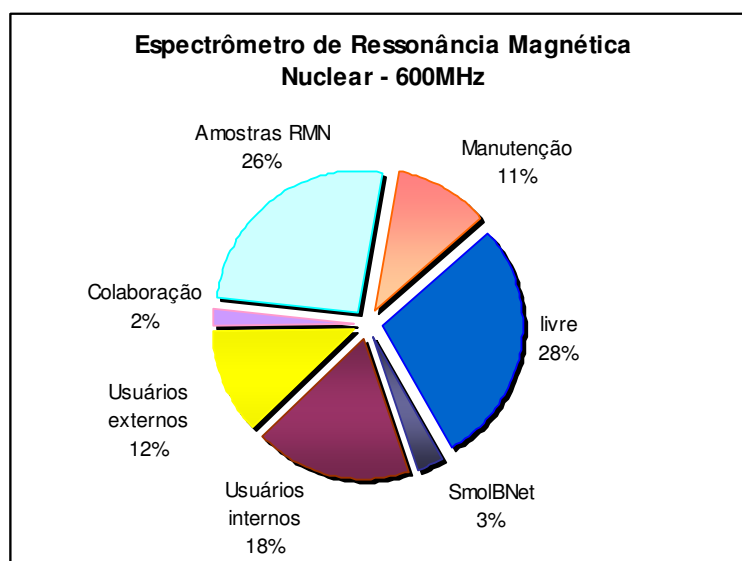
Os espectrômetros tiveram uma utilização eficiente mesmo em relação aos períodos anteriores, embora o tempo não tenha sido distribuído de forma compatível com uma instalação aberta multi-usuário. O espectrômetro de 500 MHz esteve em operação 72% do tempo sendo que 16% do tempo foi usado por pesquisadores do

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

programa SMolBNet e o restante do tempo foi usado pelo pesquisador responsável pelo laboratório ou por amostras internas do CeBiME. O espectrômetro de 600MHz esteve em operação por 61% do tempo, com 10% do tempo destinado à manutenção e 12% destinado a usuários externos. O Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear passou por uma reformulação em julho de 2005. O baixo tempo de uso destinado a usuários externos com tempo concedido pelo mérito do projeto científico foi o principal fator que levou à reformulação do laboratório de RMN.



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



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

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

### 3.2.4 – Laboratório de Espectrometria de Massas – instalação aberta, multi-usuária

Como parte da estratégia de um laboratório aberto e multi-usuário é oferecido aos seus novos usuários curso com duração de 2 dias, sobre espectrometria de massas, com foco nos princípios da técnica, da instrumentação e da sua aplicação na área de proteínas. A 2ª edição realizada em abril de 2005 contou com a participação de 47 pesquisadores.

Durante o ano de 2005 foram recebidas 87 propostas de pesquisa, das quais 51 propostas foram aprovadas para realização em 2005 e 2006. Destas, 31 foram realizadas durante o ano de 2005, além de 11 propostas aprovadas em 2004.

Os usuários do Laboratório de Espectrometria de Massa - MAS, a partir de 2006 poderão realizar experimentos mais sofisticados na área de proteoma, em função da aquisição de um cromatógrafo líquido bidimensional e de um *spotter*. O aparelho de espectrometria de massas *Maldi-TOF-TOF* apresentou problemas e sua substituição foi decidida pelo fornecedor em março de 2005, mas ainda não efetivada (dezembro 2005). Devido à demora do fornecedor em substituir o aparelho, o laboratório de massas tem operado apenas com o aparelho *Q-TOF*, cuja distribuição de tempo está no gráfico 13.

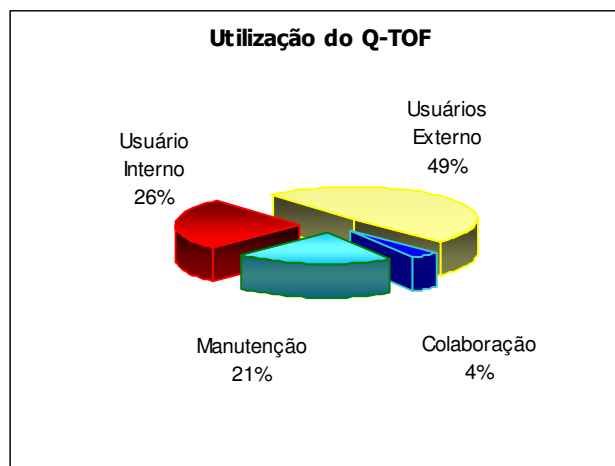


Gráfico 13: Resumo do uso do equipamento Q-TOF durante o ano de 2005



#### **4. P, D & I em Aceleradores**

##### **4.1 Comissionamento do *Wiggler* multipolar.**

A instalação do *wiggler* multipolar de 2 Tesla no anel de armazenamento foi realizada no final de fevereiro de 2005, estando o dispositivo testado e pronto para ser comissionado com feixe de elétrons já no início de março. O comissionamento transcorreu sem contratemplos, sendo possível, já nas primeiras tentativas, o fechamento do *gap* (abertura entre os polos) sem que houvesse perda do feixe. O *gap* do *wiggler* foi fechado pela primeira vez com feixe de elétrons em alta energia no dia 2 de março de 2005. O feito só foi possível graças aos preparativos iniciados no final de 2004 quando da instalação da câmara de vácuo do *wiggler*. Diferentemente das demais câmaras dos trechos retos do anel, em que a câmara de vácuo possui um diâmetro interno de 60,5 mm, a câmara do *wiggler* possui uma altura limitada em 19 mm. De modo a apressar o condicionamento das câmaras de vácuo após a ventilação de alguns trechos, passou-se a operar o anel de armazenamento em um outro modo de operação em que o feixe possui dimensão vertical particularmente reduzida no trecho 01 do anel, onde foi instalado o dispositivo de inserção. A operação nesse modo resultou num aumento do tempo de vida em alta energia, aumentando a corrente média armazenada e, como conseqüência, auxiliando no condicionamento para vácuo. Esse modo de operação é conveniente para a operação com o *wiggler* por suas características ópticas serem menos sensíveis aos efeitos dos fortes campos do dispositivo. Esse tem sido o modo de operação da fonte desde o final de 2004.

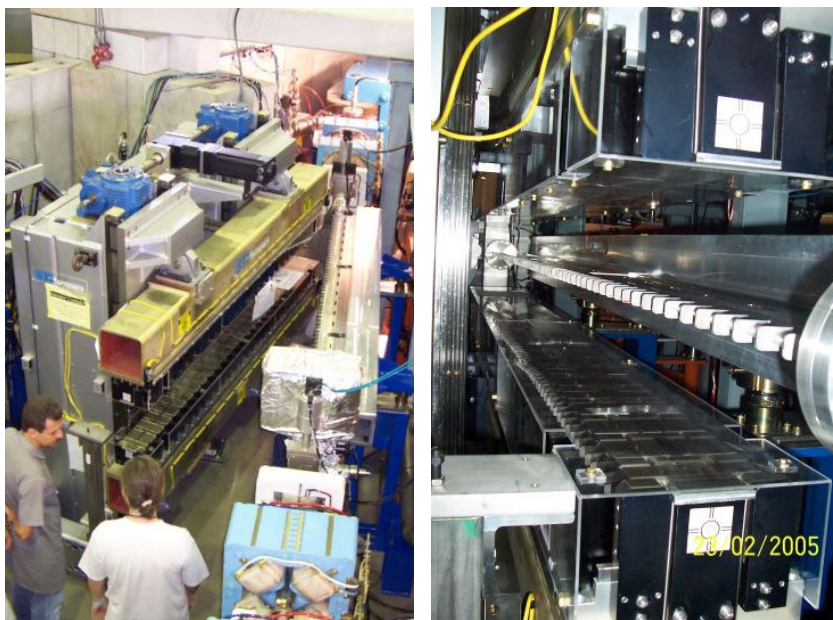


Figura 4: À esquerda, o *wiggler* sendo instalado no anel de armazenamento. À direita, uma visão do *gap* do *wiggler* aberto, posicionado junto à sua estreita câmara de vácuo.

#### 4.2 Melhoramentos na Blindagem da Fonte de Luz Síncrotron

No primeiro semestre de 2005 foi concluída a instalação da cobertura do anel de armazenamento. A cobertura foi realizada com blocos de concreto, apoiados na blindagem de concreto do lado externo do anel e em uma estrutura metálica na parte interna, sendo que esta estrutura metálica também atua como base de sustentação para blocos de concreto verticais. Como parte das melhorias na blindagem foram instaladas, também, paredes de chumbo nas saídas dos *front-ends* das linhas de luz em cada um dos 12 dipolos do anel. Uma parede de blocos de chumbo foi instalada ao longo de boa parte do perímetro do *booster* injetor. Além disso, blindagens localizadas foram adicionadas em decorrência dos resultados das monitorações dos níveis de radiação no hall experimental para diferentes condições de operação da fonte de luz, como durante o processo de injeção. Essas medidas estão em andamento e os resultados indicam que a eficácia da nova blindagem em reduzir os níveis de radiação em todos os pontos do edifício do anel é excelente. A monitoração deve prosseguir ao longo dos próximos meses para que se confirme o excelente nível de segurança radiológica do prédio.



**Figura 5: Vista de uma das paredes de chumbo instaladas nas saídas dos dipolos do anel de armazenamento.**

### **4.3 Estudos de Estabilidade de Órbita do Feixe de Elétrons**

Os esforços visando a diminuição dos problemas relacionados à estabilidade de órbita tiveram prosseguimento ao longo de todo o ano de 2005. As atividades concentraram-se principalmente na observação e análise das flutuações de órbita e do comportamento dos monitores de posição após as modificações realizadas no final de 2004. Essas modificações, que incluíram desde a blindagem das eletrônicas de medida à troca dos cabos que levam os sinais dos monitores de posição a essas eletrônicas, resultaram numa grande mudança na topologia do sistema com conseqüente diminuição generalizada no ruído de leitura dos monitores. Esse ruído é agora da ordem de  $\pm 5 \mu\text{m}$ , o que possibilitou que a correção de órbita automática voltasse a ser realizada a cada 24 segundos.

Essas mudanças foram acompanhadas de modificações realizadas no sistema de controle de baixo nível. Um grande avanço realizado em 2005 diz respeito aos primeiros testes com as novas placas do sistema de controle que utilizam o protocolo de comunicação *Ethernet*. Um bastidor especial foi desenvolvido para possibilitar a

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS** **Relatório Anual de 2005**

instalação desses nós *Ethernet* próximos às eletrônicas de leitura dos monitores de posição. Vários testes foram realizados tentando identificar as fontes de ruído na leitura de alguns monitores. As leituras provenientes desses novos nós mostraram um nível de ruído mais baixo do que os nós seriais convencionais do sistema de controle. No final de 2005 um nó *Ethernet* do sistema de controle, responsável pela leitura de dois monitores de posição, estava operando com nível de confiança tal que permitiu a sua inclusão no sistema de correção de órbitas.

A melhora sensível na qualidade da leitura dos monitores permitiu que mais atenção fosse dedicada à busca das causas daquelas variações nas medidas que não parecem resultar de problemas de leitura. Existem variações nas leituras dos monitores que parecem estar relacionados com movimentações dos próprios monitores, decorrentes do aquecimento da câmara de vácuo. Além dos deslocamentos obviamente resultantes de derivas térmicas, alguns monitores apresentam mudanças inesperadas dos patamares de leitura. Foram instaladas monitorações de movimentação mecânica e de temperatura nos monitores mais problemáticos. Esses estudos, que buscam encontrar soluções para minimizar e/ou compensar esses deslocamentos sem substituir os BPMs, continuam em andamento e devem ser intensificados em 2006.

#### **4.4 Monitores de Posição de Raios-X**

Uma outra ferramenta que será de grande valia para o estudo da estabilidade de órbita são os monitores de posição de luz síncrotron, que foram testados ao longo de 2005 e fornecem uma medida alternativa da posição vertical do feixe com base na radiação síncrotron emitida. O objetivo final do desenvolvimento desses monitores é ter medidas da posição do feixe nas próprias linhas de luz que estejam integradas ao sistema de correção de órbita, visando maior estabilidade da posição do feixe nas linhas de luz.

O projeto mecânico do monitor é baseado nas máscaras de radiação síncrotron usadas nas linhas de luz, o que permite a rápida instalação dos monitores e não exige mudanças no *layout* dos *front-ends*. O monitor é constituído de 4 lâminas de cobre polarizadas e isoladas eletricamente entre si, arranjadas em dois pares deslocados em relação ao centro, de tal forma que uma pequena parte do feixe de raios-X que entra em contato com tais lâminas gera foto-correntes cujas variações relativas de

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

intensidade são proporcionais à movimentação vertical do feixe. Movimentações lentas do feixe (da ordem de poucos segundos) podem ser então observadas com resolução micrométrica.

A primeira versão da eletrônica desenvolvida e em comissionamento processa sinais de até dois monitores de posição. Os resultados obtidos com o primeiro conjunto (monitor e eletrônica) estão em concordância com os dados fornecidos por um outro conjunto adquirido comercialmente e com as medidas obtidas com os monitores de posição de RF. Uma segunda versão da eletrônica foi recentemente concluída, permitindo maior resolução de corrente e controle de ganho, possibilitando a operação em uma faixa mais extensa de correntes do anel. Ela encontra-se em fase de testes.

### 4.5 Novos desenvolvimentos no Sistema de Controle

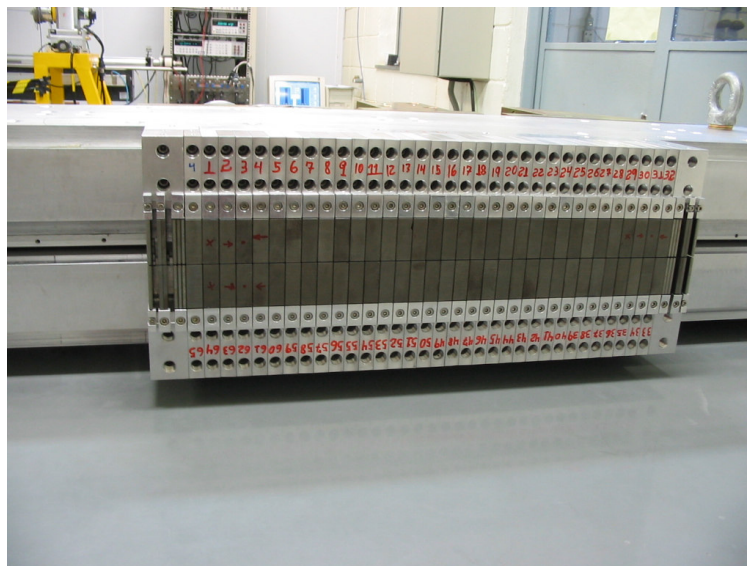
Progressos foram realizados no melhoramento do sistema de controle de baixo nível, responsável pelo controle e monitoração de todos os subsistemas da Fonte de Luz Síncrotron. O Laboratório vem trabalhando no desenvolvimento de uma nova versão do sistema de controle baseado no protocolo *Ethernet*. A placa NETLOCO, desenvolvida com a finalidade de iniciar uma progressiva transição do atual protocolo serial para o *Ethernet*, mais rápido e flexível, teve o seu batismo de fogo em 2005. A NETLOCO é uma placa *Ethernet* compatível com o padrão proprietário LOCO utilizado no LCLS. O desempenho excelente fez com que a rede *Ethernet* se expandisse rapidamente. Nós *Ethernet* estão sendo utilizados para ler os monitores de posição, fazendo, inclusive, parte do sistema de correção de órbita.

Um avanço significativo foi conseguido no desenvolvimento de *software* que faz a interface entre o sistema de controle de alto nível e o sistema de baixo nível. Uma nova versão do programa Servidor, responsável por essa comunicação, foi desenvolvida de modo a acomodar uma série de nós *Ethernet* que foram introduzidos no sistema de controle. O *software*, inicialmente desenvolvido para prover a interface entre o sistema de controle e o controle do *wiggler* multipolar, expandiu-se rapidamente de modo a acomodar uma série de equipamentos que agora se conectam ao sistema de controle via portas *Ethernet*, RS-232 e GPIB.

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

### 4.6 Construção do Ondulador

O projeto de construção do Ondulador nas oficinas do LNLs continua em andamento. Os principais avanços ocorreram na determinação da estrutura mecânica, dos mecanismos de movimentação e monitoração da posição dos cassetes e da abertura dos pólos. A estrutura de sustentação mecânica tem a forma de “C”, os *encoders* são de leitura absoluta de posição e os cassetes são pré-carregados com molas, a fim de impedir as movimentações devido a folgas nos pontos de inversão de forças. Os testes para o controle das movimentações foram realizados, verificando-se grande estabilidade na manutenção de posição. Progressos foram realizados na determinação do processo de medida dos cassetes, no refinamento do sistema de medida dos blocos (bobina de *Helmholtz*), de correção das integrais de campo por meio de *shims* virtuais e no desenvolvimento do programa de ordenamento dos blocos magnéticos nos cassetes. Os blocos de magneto permanente foram comprados, devendo ser entregues em meados de abril de 2006. O ondulador deve começar a ser montado nos primeiros meses de 2006, estando pronto para testes no final do semestre. A instalação no anel de armazenamento está programada para ocorrer em novembro de 2006.



**Figura 6:** Montagem, em seu suporte, de dois cassetes do protótipo do ondulador em construção no laboratório de ímãs do LNLs.

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

### 4.7 Outras atividades

Foi instalado no anel de armazenamento o primeiro protótipo de fonte rápida para as bobinas corretoras. Os testes mostraram excelente resultado sendo o projeto aprovado. À partir de 2006 iniciará a substituição das fontes de corretoras do Anel por novos modelos, mais leves, de manutenção mais barata e com velocidade de resposta bem maior que as atuais.

No final de 2005 foi iniciado um esforço para controlar o padrão de preenchimento do anel de armazenamento. Os experimentos realizados até o momento utilizaram a mesma base tecnológica empregada para produzir o feixe *single-bunch*. Os resultados iniciais são promissores. Controlar o padrão de enchimento seria útil não apenas como uma maneira de buscar uma maior repetibilidade das condições de operação da Fonte, mas também por alargar o espectro de possíveis experimentos realizáveis para o estudo da própria Fonte de Luz Síncrotron.

Na área de teste de moduladores foram instaladas e testadas as fontes de solenóides da *Klystron*, adquiridas em 2004 de uma empresa nacional. Essas fontes são bem mais compactas que as em operação atualmente e fazem parte do esforço realizado para implementar melhorias no acelerador linear a fim de torná-lo mais repetitivo.

## **5. Interação com o Setor Industrial**

O ano de 2005 foi um ano de crescimento e consolidação do envolvimento do LNLS com setor industrial. Foi também um período de dar continuidade aos projetos mais relevantes iniciados e, em alguns casos, até expandi-los. Os projetos de desenvolvimento tecnológico neste período envolveram as seguintes empresas: CENPES- Petrobrás, OXITENO, GETEC, Hewlett Packard HP, D&L (EUA), Bosch, NovoFilme, Instituto-Nokia. Além disto, foram realizados serviços e outros tipos de interação envolvendo o Síncrotron Soleil (França), Multibrás, entre outras instituições. As interações de destaque estão resumidas a seguir:

### **5.1 Projetos de Desenvolvimento**

#### **CENPES-Petrobrás**

O ano de 2005 marcou a parceria entre a CENPES-Petrobras e o LNLS. Dois projetos foram viabilizados: a caracterização de catalisadores com uso do Microscópio Eletrônico de Transmissão, e a caracterização de outra amostra de catalisadores usando Espectroscopia de Absorção de raios-X (XAS). O primeiro projeto foi executado pela equipe do laboratório, o segundo envolveu a locação da linha de luz para desenvolvimento de projetos de interesse do CENPES para pesquisadores da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) realizarem o projeto em convênio com o CENPES. Experimentos exploratórios de caracterização de frações de petróleo usando a linha SAXS (espalhamento de Raios-X a baixo ângulo) tiveram êxito. Com base nestes resultados preliminares, o CENPES-Petrobras e o LNLS estão considerando a realização de pesquisas conjuntas na área petroquímica, ampliando as oportunidades de interação para o ano de 2006.

#### **Oxiteno**

A parceria com a Oxiteno para caracterizar catalisadores em desenvolvimento teve início na segunda metade de 2004. A Oxiteno é uma das mais importantes indústrias brasileiras nos segmentos químico e petroquímico, sendo uma das mais atuantes produtoras de catalisadores heterogêneos de alto desempenho para



## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

aplicações nas indústrias químicas, petroquímica e de refino de petróleo. O objetivo desse projeto foi de caracterizar amostras dos catalisadores usando o Microscópio Eletrônico de Transmissão (TEM). Mais de dez amostras foram analisadas para obter informações da estrutura de suas nanopartículas, composição química e estrutura cristalográfica em estágios diferentes da reação. Os dados obtidos com o TEM ajudaram a compreender as diferenças na atividade catalítica entre as amostras e os processo de análise aos quais foram submetidos. Os resultados foram promissores e um novo projeto foi aprovado para 2006. Esse projeto inclui a análise de um novo jogo dos catalisadores que serão analisados mediante microscopia eletrônica de transmissão (TEM), espectroscopia de absorção de raios-X (DXAS), espectroscopia de foto-elétrons (XPS) e difração do raios-X (XRD). A Oxiteno também manifestou interesse em executar análise *in-situ* na linha XAFS, que deve ser explorada na fase seguinte desse projeto.

### **GETEC**

A parceria com a empresa GETEC – que tem como foco principal de negócios a conversão de açúcares em polióis, insumos amplamente utilizados na indústria farmacêutica, alimentícia e química – começou em 2002. Esse projeto tem hoje duas metas: melhorar o catalisador "Ni-Raney", que são estruturas de Ni (metal) altamente porosas, e explorar tecnologias novas para o processo de hidrogenação. No primeiro caso, um especialista foi deslocado para se dedicar integralmente ao projeto. A liga de NiAl produzida pela GETEC foi caracterizada e obteve-se informações importantes sobre as fases e sua homogeneidade cristalográfica. Começou-se também uma caracterização detalhada do catalisador produzido pela GETEC, comparado ao comercial. Para isso, foram usadas técnicas como difração de raios-X, espectrometria de foto-elétron, microscópio SEM, entre outras.

As diferenças entre esses catalisadores foram identificadas e, junto com a GETEC, teve início um programa para melhorar o método utilizado para produzir os catalisadores. No final de 2005, um reator da hidrogenação foi instalado – sendo possível agora melhorar o desempenho do catalisador em avaliação no LNLS, o que está planejado para 2006. Com relação ao processo de hidrogenação, o LNLS está desenvolvendo pesquisas para testar nanopartículas de Ni de tamanhos diferentes para as atividades de catálise. Dependendo das condições de síntese, a estrutura cristalográfica das partículas é modificada e isso pode afetar sua atividade catalítica –

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

o que também foi avaliado. O projeto de colaboração GETEC-LNLS recebe financiamento do fundo setorial Verde-Amarelo (FNDCT) e uma contrapartida da própria GETEC. Para o período de 2005-2006, o projeto será co-patrocinado pela GETEC e pelo CNPq como parte de um programa especial de nanotecnologia.

### **Hewlett Packard (HP)**

Numa parceria estimulada pela Lei de Informática, a HP do Brasil e o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron trabalham juntos para investigar novas propostas de implementação de sistemas nanométricos para dispositivos à base de efeitos quânticos para informação quântica. A parceria, iniciada em 2002, continuou nos anos seguintes e gerou resultados científicos e tecnológicos interessantes. A pesquisa teve dois focos principais: identificação de componentes em escala nano com microscópio de força atômica e desenvolvimento de cavidades *GHz* em sistemas eletrônicos associados. Os resultados dos trabalhos foram apresentados na forma de uma dissertação de mestrado e diversas apresentações em conferências.

### **Welding Fumes Analysis (D&L)**

O contato entre o LNLS e a D&L começou em 2004 como um projeto para identificar emissões geradas durante a solda e corte de diversos materiais, como chapas de aço inox e placas de carbono. O projeto foi expandido e mais sete materiais de consumo foram avaliados em 2005. As emissões que se desprendiam da solda foram analisadas e constatou-se que continham partículas de vários tamanhos e composições, representando potencial risco à saúde. A natureza e o tamanho das partículas foram relatados por sua toxicidade para o corpo humano.

Foi preciso caracterizar essas partículas no microscópio de forma a compreender inteiramente como eram geradas e o seu efeito real na saúde. Métodos de captura elétrica e as técnicas SEM, TEM, EDS, XRD e XPS foram usados para coletar as emissões de modo a analisar partículas de vários tamanhos – algumas tão pequenas quanto 30nm. O uso dessas técnicas permitiu chegar a resultados que já estão tendo impacto na indústria, permitindo o desenvolvimento de materiais de consumo mais seguros e melhorando o ambiente de trabalho. Esse estudo é reconhecido como o mais detalhado já executado nos últimos anos. O projeto foi concluído e mais de 20 relatórios técnicos confidenciais foram produzidos. A equipe

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

envolvida está se concentrando agora em produzir artigos científicos para divulgar os resultados.

### **Bosch**

A parceria entre o LNLS e a Bosch (do Brasil e da Alemanha) começou em 2004 com o objetivo de desenvolver sistemas de injeção de alta pressão para automóveis de alto padrão. O projeto continuou no ano passado e as perspectivas para 2006 são excelentes. A Bosch já tinha começado a produzir uma pequena série desses sistemas, mas a parceria com o laboratório foi fundamental para a nacionalização do projeto. O LNLS participou de todo o processo, avaliando materiais e testando protótipos. A Bosch tem desenvolvido agora uma linha de produção dedicada a esses sistemas e já trabalha na otimização e automação da linha. Um novo projeto está em análise junto à Bosch para desenvolver testes que facilitem e agilizem esse processo.

### **NovoFilme**

Esse programa é uma continuação do acordo celebrado em 2004. O objetivo é a obtenção de células combustíveis a partir de grafite natural nanoestruturado, financiado por meio de projeto CNPq/FVA. Durante este ano a empresa manteve um estagiário em tempo integral no laboratório de microfabricação trabalhando no desenvolvimento de moldes metálicos para aplicação nas células a combustível. Um conjunto de moldes foi projetado, fabricado e entregue à Novofilme para produção em escala industrial.

## **5.2 Serviços**

### **Síncrotron Soleil**

O novo laboratório síncrotron em construção na França, o Síncrotron Soleil, contou com a colaboração do LNLS para fabricar seus combinadores de potência – um dos elementos mecânicos mais importantes dos amplificadores – que alimentam as quatro cavidades supercondutoras de RF do anel. Os modelos entregues ao Soleil são conceitualmente similares aos que foram usados no sistema do RF da fonte de luz do

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

LNLS que, por sua vez, foram desenvolvidos com a colaboração do grupo do RF do LURE (França).

**Serviços da análise de materiais - SEM, TEM, XPS**

Diversos serviços de análise de materiais com SEM, TEM e XPS foram fornecidos rotineiramente às companhias brasileiras. Entre as que usaram a infraestrutura do LNLS para esse tipo de análise em 2005 estão: Bosch, Rodhia e Pirelli. Materiais diferentes, como os polímeros, aços, papel, componentes microeletrônicos e fibra ótica, estão entre os mais estudados.

## **6. Informação, Educação e Divulgação**

### **6.1 – Informação científica e Administrativa**

#### **Biblioteca**

Os serviços oferecidos pela Biblioteca prosseguiram regularmente. Foi submetido pedido de financiamento para compra de livros sob o título "Gestão de Acervo para a Biblioteca do LNLS" junto ao Programa FAP-Livros da FAPESP. Atualmente o acervo possui 5.844 livros, assinaturas de 57 títulos de periódicos estrangeiros, dos quais 26 com acesso eletrônico, 18 títulos de periódicos nacionais. O LNLS manteve durante todo o ano de 2005 o acesso ao Portal de Periódicos da CAPES por intermédio do apoio do Ministério de Ciência e Tecnologia.

#### **Informática e Internet**

Os registros de operação da Fonte de Luz Síncrotron e os cálculos estatísticos foram migrados para uma nova plataforma Cliente/Servidor e *Web* para permitir a centralização das informações e acompanhamento sistemático dos dados.

Este Projeto foi subsídio para uma nova ferramenta que consolida os indicadores do Contrato de Gestão. Por meio do "Painel de Indicadores do Contrato de Gestão" os gestores poderão acompanhar de forma on-line a evolução dos indicadores e a execução do plano estratégico. Tornou-se possível acompanhar o cumprimento das metas e adotar ações adequadas para garantir a sua realização.

Em 2005 foi consolidado o sistema de informação para automatizar o processo gerenciado pela Secretaria do LNLS de acompanhamento das Solicitações de Auxílio para Viagens e Participação em Eventos (SAVE). O Sistema SAVE permitirá realizar as solicitações de viagens pela *Web* sendo que a avaliação também ocorrerá de forma eletrônica. O sistema facilitará o acompanhamento das normas estabelecidas em instrução normativa própria.

Ainda em 2005 iniciou-se o projeto de desenvolvimento do sistema GesPP – Gestão de Propostas de Pesquisa. Este sistema visa automatizar os processos de avaliação, agendamento, vinda do usuário e pós-execução dos experimentos propostos nas instalações abertas do LNLS. O GesPP propõe tornar o processo mais dinâmico tanto na gestão das propostas como no processo de submissão pelos usuários, permitindo o acompanhamento pela *Web* da situação da proposta de pesquisa. Está em análise a integração do sistema GesPP com a Plataforma Lattes do

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

CNPq para melhorar a atualização do cadastro de usuários e das publicações geradas pelas propostas científicas executadas no LNLS.

### **Home Page do LNLS**

Em 2005 iniciaram os trabalhos para especificação de *software* comercial de gerenciamento de conteúdo e de publicação na *Web* aderente ao Projeto de reestruturação da página do LNLS. Com o *software* de gerenciamento de conteúdo e de Publicação na *Web* deverá ser possível criar, organizar, publicar, atualizar e divulgar conteúdos gerados pelos colaboradores do LNLS.

### **Acesso Remoto**

Foi desenvolvido sistema para acessar por aparelho celular informações do status da fonte de luz síncrotron. Com teclas de navegação os operadores e usuários podem consultar o gráfico que indica a energia, corrente e tempo de vida da fonte de luz.

Neste mesmo programa foi iniciado projeto para a visualização remota de dados experimentais gerados por equipamentos científicos complexos, como os microscópios eletrônicos instalados no Laboratório de Microscopia.

### **Melhoramento da Rede de Dados e Internet**

Como unidade primária qualificada pela RNP (Rede Nacional de Ensino e Pesquisa), o LNLS se conectou ao *backbone* da *Internet* acadêmica RNP2 melhorando significativamente o acesso à *Internet*. No *backbone* RNP2 a banda de comunicação foi elevada de 10 Mbps para 34 Mbps o que vem permitindo a aplicação de serviços avançados de rede, como Vídeo Digital, Vídeo Conferência e Voz sobre IP. O acesso à iniciativa *Internet 2* foi ampliado com as conexões via Rede Clara (Cooperação Latino-Americana de Redes Avançadas), sendo que o aumento da largura de banda de última milha fim a fim para redes acadêmicas de 240%.

O enlace óptico estabelecido entre o campus do LNLS e da UNICAMP/Rede ANSP foi mantido como redundância ao acesso *Internet*, por ser este serviço de missão crítica. O sistema de redundância foi desenvolvido permitindo a troca de redes de forma automática nas ocorrências de falhas entre as redes Unicamp/ANSP e *backbone* RNP2.

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

Também foi implementada ferramenta de combate a mensagens não solicitadas (*Spam's*) no serviço de correio eletrônico, diminuindo o desperdício de tempo dos colaboradores do LNLS assim como vulnerabilidades de segurança.

Foram ampliadas as áreas de acesso à rede de dados sem fio possibilitando maior mobilidade dos recursos computacionais dos colaboradores e usuários do LNLS.

### **Projeto GIGA “Organização Virtual” – RNP/FINEP**

Por meio do sub-projeto “Organização Virtual” do Projeto GIGA da RNP, financiado pela FINEP, o LNLS estruturou *cluster* de servidores de alto desempenho que está em produção e roda aplicativos científicos paralelizados.

O cluster do LNLS forma uma *grid* computacional experimental com o LNCC (Laboratório Nacional de Computação Científica) para colaboração de pesquisadores e compartilhamento de recursos computacionais e de *software*. Esta *grid* opera experimentalmente sobre uma rede óptica de alto desempenho, com banda larga de comunicação de 2,5Gbps.

### **Melhoramento da infra-estrutura de Informática**

Nas atividades de melhoria da infra-estrutura de tecnologia da informação, foi estruturado novo serviço de Vídeo Digital para divulgação on-line pela *Web* de seminários realizados no LNLS. Através das tecnologias de Vídeo Digital o LNLS ampliará a difusão do conhecimento científico para pesquisadores situados em outras regiões do Brasil e do exterior utilizando novas mídias de comunicação. O acervo digital dos eventos poderá ser consultado pela comunidade de usuários do LNLS. Em 2005 o curso "Investigação de Estruturas de Proteínas por RMN" transmitido por *streaming* de vídeo teve a audiência na *Internet* de 190 pessoas no Brasil e exterior.

Com o objetivo de aumentar a segurança patrimonial das instalações e pessoal dos técnicos e pesquisadores, foram reestruturados e ampliados os pontos de controle de acesso físico restrito nas áreas controladas. O novo sistema de controle de acesso deverá ser integrado com o sistema de ponto eletrônico e de controle de refeições do restaurante.

## **6.2 – Educação e Produção Científica**

A tabela 11 relaciona os pesquisadores do quadro funcional da ABTLuS em atividade durante o ano de 2005.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<b>Ord.</b>	<b>NOME</b>	<b>Observações</b>
1	ALBERTO SPISNI	Término: jun/05
2	ANTONIO JOSE RAMIREZ LONDONO	
3	ANTONIO RUBENS BRITTO DE CASTRO	Associado/Unicamp
4	ARNALDO NAVES DE BRITO	
5	BEATRIZ GOMES GUIMARAES	
6	CARLOS HENRIQUE INACIO RAMOS	
7	CELSO EDUARDO BENEDETTI	
8	DANIEL MARIO UGARTE	Associado/Unicamp
9	DANIELA ZANCHET	
10	EDUARDO GRANADO MONTEIRO DA SILVA	Associado/Unicamp
11	FLAVIO GARCIA	
12	FRANCISCO JAVIER MEDRANO MARTIN	
13	GILBERTO MEDEIROS RIBEIRO	
14	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO	
15	HARRY WESTFAHL JUNIOR	
16	HELIO CESAR NOGUEIRA TOLENTINO	
17	IGOR POLIKARPOV	Associado/USP-IFSC
18	IRIS CONCEPCION LINARES DE TORRIANI	Colaboradora
19	JOAO ALEXANDRE R GONCALVES BARBOSA	
20	JORG KOBARG	
21	NILSON IVO TONIN ZANCHIN	
22	PEDRO FERNANDES TAVARES	
23	RICHARD LANDERS	Associado/Unicamp
24	ROGERIO MAGALHAES PANIAGO	Associado/UFGM
25	SERGIO TEIXEIRA FERREIRA	Associado/UFRJ

**Tabela 11: Pesquisadores da ABTLuS**

O LNLS tem 17 pesquisadores em dedicação exclusiva, 7 pesquisadores associados e 1 pesquisador colaborador. Com o aumento do número de instalações e programas de pesquisa, há necessidade de ampliar o quadro de pesquisadores. Esforços estão sendo feitos nesta direção.

Para efeito de cálculo dos indicadores de desempenho pactuados no Contrato de Gestão, são considerados um total de 21 pesquisadores (os pesquisadores associados e colaboradores são considerados na regra 1/2 pesquisador).



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Os pesquisadores da ABTLuS orientaram 87 estudantes durante o ano de 2005, dos quais 32 de iniciação científica, 6 bolsistas de Mestrado, 43 bolsistas de Doutorado, 6 projetos de bolsas técnicas. No programa de Iniciação Científica, destaca-se o programa PIBIC, onde o LNLS possui uma quota de 20 bolsas.

Foram supervisionados 18 pós-doutores. Em 2005, foi criado o programa de pós-doutorado 2+3 financiado pelos recursos da ABTLuS. Este programa tem por objetivo ampliar a participação dos pós-doutores nas atividades do laboratório. Atualmente, um pós-doutor 2+3 já iniciou seus trabalhos e três foram aprovados devendo iniciar suas atividades até março de 2006.

<b>ORD.</b>	<b>PÓS-DOCTORES</b>	<b>DOCTORADO</b>	<b>INSTITUIÇÃO</b>	<b>FOMENTO</b>
1	ANGELO MALACHIAS DE SOUZA	FISICA	UFMG	FAPESP
2	CARLOS MARIO GARZON OSPINA	ENGENHARIA METALURGI	USP	CNPQ
3	CAROLINE RIBEIRO DE BORJA OLIVEIRA	FARMACOLOGIA	UNICAMP	CNPQ
4	CEDRIC HESLING	BIOLOGIA MOLECULAR	UCFI, FRANÇA	CNPQ
5	CRISTIANO LUIS PINTO DE OLIVEIRA	FISICA	UNICAMP	CNPQ
6	DANIEL CARLOS BIGGEMANN TEJERO	FISICA	UNICAMP	CNPQ
7	ESTEBAN DAMIAN AVENDANO SOTO	FISICA	UNIV. SUECIA	CNPQ / PCI-DTI
8	HENRIQUE FERREIRA	BIOLOGIA	UNIV. INGLATERRA	FAPESP
9	HERBERT WINNISCHOFER	QUIMICA	USP	CNPQ
10	LEANDRA WATANABE	BIOFÍSICA MOLECULAR	UNESP	FAPESP
11	LUCIA HELENA COUTINHO	FISICA	UNICAMP	FAPESP
12	MANOEL GUSTAVO PETRUCCELLI HOMEM	FISICA	UFSCAR	FAPESP
13	MARCIA REGINA SOARES DA SILVA	BIOFÍSICA	UFRJ	FAPESP
14	MARCOS ANTONIO DE OLIVEIRA	GENÉTICA E BIO. MOLECULAR	UNICAMP	FAPESP
15	MARIO SANCHES MATILDE JUNIOR	FISICA	USP - CARLOS	ABTLuS
16	MAURICIO LUIS SFORÇA	QUIMICA	UNICAMP	FAPESP
17	SERGIO OYAMA JUNIOR	BIOQUIMICA	USP	FAPESP
18	THELMA DE AGUIAR PERTINHEZ	BIOQUIMICA	USP	FAPESP

**Tabela 12: Pós-doutores supervisionados pelos pesquisadores da ABTLuS**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<b>ORD.</b>	<b>DOCTORANDOS</b>	<b>GRADUAÇÃO</b>	<b>INSTITUIÇÃO</b>	<b>FOMENTO</b>
1	ALEXANDRE JOSE CHRISTINO QUARESMA	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
2	ALINE ALMEIDA FIGUEIREDO DA SILVA	CIENCIAS BIOLOGICAS	PUCCAMP	FAPESP
3	ALINE LIMA DE OLIVEIRA	QUIMICA	UNICAMP	FAPESP
4	AMANDA ABDALLA VALERIO	FARMÁCIA E BIOQUÍMICA	UNIP	FAPESP
5	ANA OLIVIA TIROLI	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	CNPQ
6	BEATRIZ SANTOS CAPELA ALVES	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
7	CAMILA RAMOS DOS SANTOS	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
8	CARLA AZIMONTE	FISICA	UNICAMP	FAPESP
9	CARLOS LUIS MAYORGA ESPINOZA	FISICA	UNIV.COSTA RICA	CLAF
10	CRISTIANO TELES DE MENESES	FISICA	UNI.FED.SERGIPE	CNPQ
11	DANIEL HENRIQUE DO AMARAL CORREA	BIOMEDICINA	UNIARARAS	FAPESP
12	DANIEL MARANHO TRINDADE	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNESP	FAPESP
13	DARIO OLIVEIRA DOS PASSOS	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
14	DENISE BASSO NAKABAYASHI	FISICA	UNICAMP	FAPESP
15	EDMILSON RUI	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
16	ELIANA MARIA ASSMANN	BIOLOGIA	UFRGS	FAPESP
17	FABIO CUPRI RINALDI	FISICA	UNICAMP	FAPESP
18	FELIX GUILHERMO GONZALEZ HERNANDEZ	FISICA	UCR - COSTA RICA	FAPESP
19	FLAVIA RAQUEL GONÇALVES CARNEIRO	BIOLOGIA	UERJ	FAPESP
20	GUSTAVO COSTA BRESSAN	BIOQUÍMICA	UFV	FAPESP
21	JULIANA FERREIRA DE OLIVEIRA	BIOLOGIA	UFV	FAPESP
22	JULIANA HELENA COSTA SMETANA	BIOLOGIA	UNICAMP	CNPQ
23	KAREN FULAN DISCOLA	QUIMICA	UNICAMP	FAPESP
24	KELLY SANTOS	BIOLOGIA	UFSC	FAPESP
25	LETICIA KHATER	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
26	MARCELA HERNANDEZ JIMENEZ	FISICA	UCR - COSTA RICA	FAPESP
27	MARINA MARQUES TEIXEIRA VANINI	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
28	MARINA SOARES LEITE	QUIMICA	UFPE	FAPESP
29	MAYA PAOLA CERRO VERGARA	FISICA	UNIANDRES-COSTA RICA	CNPQ
30	NARCIZO MARQUES DE SOUZA NETO	FISICA	UFPB	CNPQ
31	NATALIA PRADO DE ABREU	FISICA	UNICAMP	FAPESP
32	ODALYS GARCIA CABRERA	BIOLOGIA	UH-BRASIL	CAPES
33	PATRICIA PEREIRA COLTRI	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
34	PATRICIA RIBEIRO DE MOURA	QUIMICA	UNICAMP	FAPESP
35	RAFAEL MONTEIRO FERNANDES	FISICA	UNICAMP	CNPQ
36	RAUL ANDRES CERNADAS	BIOTECNOLOGIA	UNL-ARGENTINA	FAPESP
37	ROSICLER LAZARO BARBOSA	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
38	SANDRA MARA NARESSI SCAPIN	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
39	THAIS HALINE VAZ	BIOQUIMICA	UNICAMP	CNPQ
40	THIAGO CARLOS CAGLIARI	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
41	THIAGO PEDRO MAYER ALEGRE	FISICA	UNICAMP	FAPESP
42	TULIO COSTA RIZUTTI DA ROCHA	FISICA	UNICAMP	FAPESP
43	WILIAM CESAR BENTO REGIS	CIENCIAS BIOLOGICAS	UEMG	FAPESP

**Tabela 13: Estudantes de doutorado orientados pelos pesquisadores da ABTLuS.**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

ORD.	MESTRANDOS	GRADUAÇÃO	INSTITUIÇÃO	FOMENTO
1	AMADEU HOSHI IGLESIAS	QUIMICA	UNICAMP	CAPES
2	ANTONIO CARLOS TORREZAN DE SOUSA	ENGENHARIA ELETRICA	UNICAMP	CAPES
3	JULIO CESAR DA SILVA	FISICA	UNICAMP	CNPQ
4	MAUREEN JOEL LAGOS PAREDES	FISICA	UNICAMP	CNPQ
5	PABLO ROBERTO FERNANDEZ SILES	FISICA	UCR COSTA RICA	FAPESP
6	RAFAEL MOLENA SERAPHIM	ENG DE MATERIAIS	USF	FAPESP

**Tabela 14: Estudantes de mestrado orientados pelos pesquisadores da ABTLuS**

ORD.	BOLISTA DE INIC CIENTÍFICA	CURSO	INSTITUIÇÃO	AG.FOMENTO
1	ALEKSEY VICTOR TREVILIN COVACEVICE	ENG COMPUTAÇÃO	UNICAMP	CNPQ / PIBIC
2	ALEXANDRA BOTTCHER	BIOLOGIA	UNICAMP	CNPQ
3	ANA PAULA ROSSI	CIENCIAS BIOLÓGICAS	PUCCAMP	CNPQ/ PIBIC
4	BRUNO RUBENS FLAUSINO TEIXEIRA	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
5	EDUARDO GOMES DOS REIS	ENGENHARIA ELETRICA	UNICAMP	CNPQ
6	FELIPE LIMA MAGALHAES	FISICA MEDICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
7	FELIPE TIJIWA BIRK	FISICA	UNICAMP	CNPQ
8	FERNANDO HIDEJI ITO	ENGENHARIA MECANICA	UNICAMP	CNPQ
9	GILBERTO FERNANDES LOPES FABBRIS	FISICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
10	GIOVANNI ALESSANDRO FIORENTINI	ENGENHARIA ELETRICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
11	HUGO SAKAI IDAGAWA	ENGENHARIA MECRATRON	UNICAMP	FAPESP
12	JAVA ATAYDE PEDREIRA DA SILVA	FÍSICA	UNICAMP	CNPQ/ PIBIC
13	JOÃO GOMES PEREIRA JUNIOR	ENGENHARIA MECANICA	UNICAMP	CNPQ
14	KALIANDRA DE ALMEIDA GONÇALVES	BIOLOGIA	PUCCAMP	FAPESP
15	KARINE FERNANDA DOS SANTOS	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
16	LEONARDO GIANTINI TRABUCO	CIENCIAS MOLECULARES	USP	FAPESP
17	LILIAN PAVANI	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	CNPQ
18	LUIS HENRIQUE ARAUJO	ENGENHARIA ELETRICA	UNICAMP	CNPQ
19	MARCOS ANTONIO DA SILVA ELEOTERIO	FISICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
20	MARCOS RODRIGO ALBORGHETTI	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
21	MARCOS TADEU DOS SANTOS	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
22	MARICLER PONTES PELLEGRINI	CIENCIAS BIOLÓGICAS	PUCCAMP	CNPQ/PIBIC
23	OSMAR RODRIGUES GARCIA JUNIOR	MECATRONICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
24	PRISCILA OLIVEIRA DE GIUSEPPE	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
25	RAFAEL GUSMÃO DOS SANTOS	ENGENHARIA ELETRICA	UNICAMP	CNPQ/ PIBIC
26	RAFAEL LESSA VIEIRA DE SA MENEZES	FISICA	UNICAMP	CNPQ/ PIBIC
27	RAFAEL RAMOS CASTELLARI	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
28	RAFAEL SOARES PINTO	FISICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC
29	RAQUEL RODRIGUES RAMPASIO	QUIMICA	UNICAMP	CNPQ/ PIBIC
30	TAIS MAYUMI KUNIYOSHI	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
31	THOMAZ FISCHER LEVY	ENGENHARIA ELÉTRCIA	PUCCAMP	CNPQ/PIBIC
32	VITOR TOSHIYUKI ABRAO OIKO	FISICA	UNICAMP	CNPQ/PIBIC

**Tabela 15: Estudantes de iniciação científica orientados em 2005.**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Durante o ano de 2005 foram realizados 6 cursos, 1 oficina e 1 workshop conforme detalhamento na tabela 16. A demanda pelos cursos é grande, sendo que o número de participantes é limitado pelas condições práticas de cada curso.

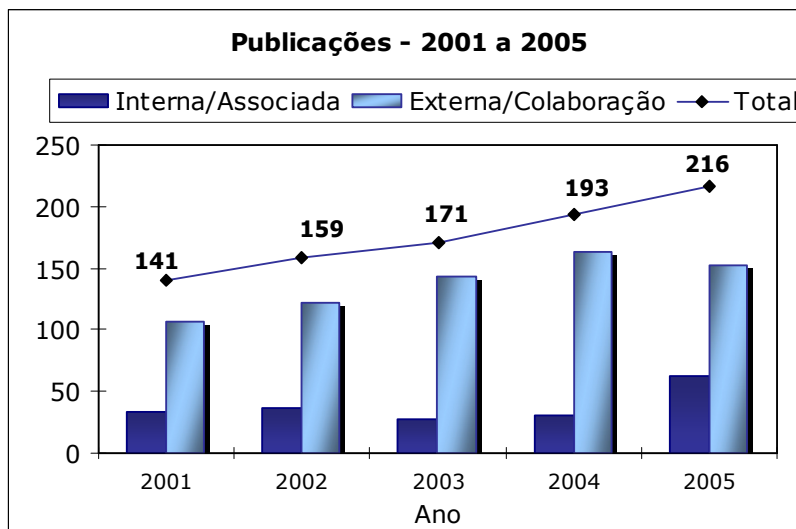
<b>Título</b>	<b>Responsável</b>	<b>Período</b>	<b>Qtd.</b>
Curso sobre Espectrometria de Massa, com foco das técnicas, da instrumentação e sua aplicação na área de proteínas.	Fábio Gozzo	24 a 25/04	47
Workshop sobre técnicas e resultados de ponta referente estudos estruturais de Polímeros usando radiação de Síncrotron.	Iris Torriani	25/2	42
II Oficina de Aplicações de Luz Síncrotron e Microscopias em Catálise.	Daniela Zanchet	23/2	49
Sondando a Matéria com Raios-X Duros: Um wiggler para Ciências dos Materiais no LNLS.	Eduardo Granado	21 a 22/07	18
Coleta de Dados na Linha MX1 (Cristalografia de Macromoléculas) do LNLS.	Beatriz Guimarães	11 e 12/08	10
Elementos de Difração de Pó com Luz Síncrotron.	Fabio Furlan	22/9	23
Curso teórico sobre Ressonância Magnética Nuclear.	Ana Carolina Zeri	22 e 23/11	26
Curso sobre Espectrometria de Massa, com foco das técnicas, da instrumentação e sua aplicação na área de proteínas.	Fábio Gozzo	30/11 e 01/12	34

**Tabela 16: Cursos realizados no LNLS em 2005.**

Destaca-se a realização do curso teórico-prático em RMN de proteínas, oferecido entre 22 e 23 de novembro de 2005, o qual teve 118 inscritos dos quais 26 foram selecionados para participar. Visando atender aos demais inscritos que não puderam ser selecionados, o LNLS ofereceu transmissão do curso simultaneamente pela Internet. Este curso representa o início da reestruturação do Laboratório de RMN.

O banco de dados da produção bibliográfica registra até o momento 216 artigos em periódicos indexados, resultantes de pesquisas internas e/ou com a participação de pelo menos um pesquisador do quadro da ABTLuS, sendo que 11 artigos foram publicados em revistas com fator de impacto maior que 5.

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005



**Gráfico 14: Evolução das publicações de artigos em periódicos indexados**

A atualização da produção bibliográfica é intensificada anualmente por meio de consulta a base do Currículo Lattes do CNPq. Em uma recente pesquisa ao banco de produção bibliográfica da ABTLuS constatou o acréscimo de 98 artigos em periódicos indexados, publicados nos últimos 5 anos, que não foram considerados no ano de sua publicação para efeito do indicador de desempenho da ABTLuS. Esta discrepância ocorre porque a atualização depende de informações dos usuários, apresentando uma incerteza na estatística.

A força de trabalho da ABTLuS recebeu em média 40 horas de treinamento durante todo o ano, incluindo cursos de aperfeiçoamento profissional de longa e curta duração.

Em 19 de agosto de 2005 do Programa Nacional de Nanotecnologia foi anunciado pelo Ministro de Ciência e Tecnologia, Sergio M. Rezende, o Programa Nacional de Nanotecnologia durante a visita do Presidente da República, Luiz Inácio Lula da Silva às instalações do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, com a presença de autoridades políticas e representantes de vários segmentos da comunidade científica do país.

Finalmente, deve-se registrar a realização da XV Reunião Anual de Usuários, nos dias 21 e 22 de fevereiro de 2005 que contou com a presença de 340 usuários e a realização da 14ª edição do Programa Bolsas de Verão, nos meses de janeiro e

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

fevereiro, voltado para o estímulo de jovens estudantes universitários para a pesquisa e no desenvolvimento tecnológico. Essa edição teve a participação de 14 jovens.

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS** **Relatório Anual de 2005**

### **7. Gestão e Planejamento**

Foi assinado em 08 de junho o 12º Termo Aditivo do Contrato de Gestão, referente ao orçamento de 2005, sendo que os repasses ocorreram somente a partir de 16 de junho de 2005. As atividades de atendimento aos usuários do LNLS somente puderam ser mantidas devido às reservas financeiras de operação e os repasses de Restos a Pagar, referente ao ano de 2004.

O contrato de gestão firmado com o Ministério de Ciência e Tecnologia - MCT, prevê o repasse de recursos financeiros no montante de R\$ 21.702 milhões para os seguintes programas de trabalho: P&D e Aplicação da Luz Síncrotron e outros aceleradores, no valor de R\$ 18.042 milhões; P&D em Biologia Molecular Estrutural, no valor de R\$ 2.860 milhões; Desenvolvimento de pesquisa da Rede Nacional de Proteoma, no valor de R\$ 710,820 mil e Apoio a Projetos Estratégicos em Biotecnologia, o valor de R\$ 89,180 mil. Houve o repasse na sua integralidade, sendo que a última parcela foi recebida em 2 de janeiro de 2006.

As responsabilidades de prestação de contas previstas no Contrato de Gestão foram atendidas. As demonstrações financeiras foram publicadas no Diário Oficial da União e no Jornal da Ciência, assim como o Parecer dos Auditores Independentes. O Relatório Semestral de Gestão de 2005 está disponível na página do LNLS.

A Controladoria Geral da União do Estado de São Paulo realizou a auditoria referente ao exercício de 2004, no período de 21 de março à 8 de abril, tendo sido recebido o Relatório Final, Certificado e Parecer do Controle Interno em setembro de 2005, onde se conclui pela Regularidade com ressalvas da gestão da Instituição. Em 2005 as recomendações da auditoria passaram a ser acompanhada por meio de um Plano de Providências. O plano contém todas as recomendações da auditoria *in loco*, expõe o posicionamento do Gestor, providências implementadas e as futuras e o prazo de conclusão de cada uma. Desse modo, espera-se intensificar os controles internos da instituição com melhorias de processos.

Foram disponibilizadas as peças do Processo de Prestação de Contas da Instituição na página do laboratório, [www.lnls.br](http://www.lnls.br), conforme o que determina a portaria nº 262/2005 do Ministro de Estado do Controle e da Transparência sobre a forma de divulgação da Prestação de Contas Anuais.

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

Neste ano, por iniciativa do Ministério de Ciência e Tecnologia, foi realizado o Planejamento Estratégico para as Unidades do MCT com suporte técnico-administrativo do Centro de Gestão e Estudos e Projetos Estratégicos (CGEE). A ABTLuS fez parte desse processo, adequando a metodologia proposta ao seu processo de planejamento, o que resultou em uma dinâmica própria. Em 21 de dezembro de 2005 a Minuta do Plano Diretor da ABTLuS foi submetido ao Conselho de Administração para análise.

Em 2005 foi iniciado e concluído o processo de inventário dos bens do ativo permanente imobilizado de responsabilidade da Instituição, inclusive daqueles adquiridos com recursos de agência de fomento. Todos os bens identificados receberam novo controle magnético contendo código de barras, o que facilitará e agilizará a localização dos mesmos nos próximos processos de inventário.

### 7.1 Relatório Financeiro

A evolução e composição do orçamento da ABTLuS pode ser observado no gráfico 15.

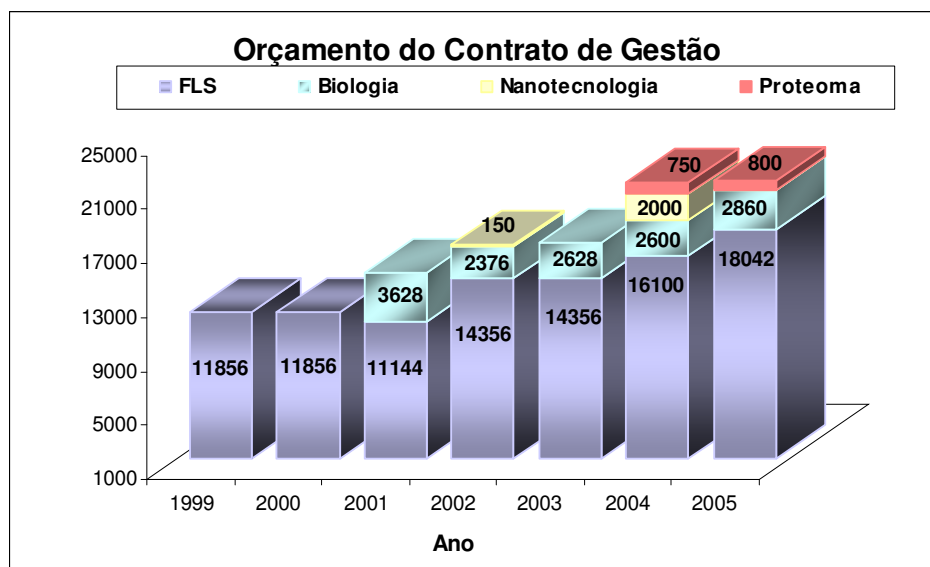
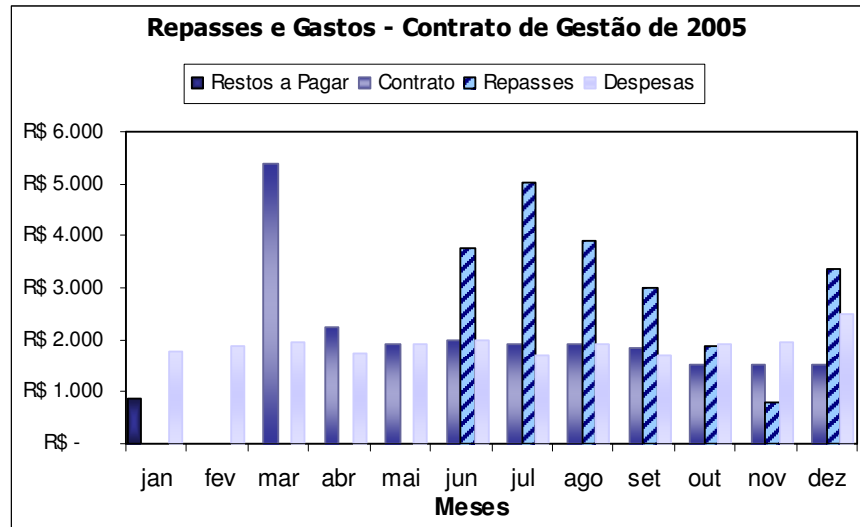


Gráfico 15: Orçamento do Contrato de Gestão da ABTLuS.



## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

O fluxo de repasses do Contrato de Gestão pode ser observado no gráfico 16.



**Gráfico 16: Repasses e gastos em 2005. Estão incluídos no mês de dezembro os recursos que foram depositados no dia 2 de janeiro de 2006.**

As fontes de recursos da ABTLuS durante 2005 foram principalmente do Contrato de Gestão, auxílios de Fomento, dos Fundos Setoriais, contratos com a indústria e provenientes de vendas de serviços e rendimentos de aplicações financeiras, como demonstrado na tabela 17.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

(R\$1.000,00)

<b>Receitas e Despesas - ABTLuS</b>	<b>2005</b>	<b>%</b>
<b>Receitas</b>	<b><u>35,953</u></b>	<b>100%</b>
Contrato de Gestão	22,557	63%
Orçamento 2004	0,855	
Fonte de Luz Síncrotron	18,042	
Biologia Molecular Estrutural	2,860	
Proteoma	0,800	
Nanotecnologia	-	
Outras Fontes	<u>13,396</u>	37%
Vendas, receitas financeiras e outras	3,791	
Pessoal CNPq e Bolsas	2,259	
Agências de Fomento	7,347	
<b>Despesas</b>	<b><u>R\$ 37,217</u></b>	<b>100%</b>
<b>Despesas Correntes</b>	<b><u>R\$ 25,346</u></b>	<b>68%</b>
Pessoal	<u>R\$ 13,634</u>	
ABTLuS	11,375	
Pessoal CNPq e Bolsas	2,259	
Materiais e serviços	14,454	
Equipamentos fabricados no LNLS <sup>a</sup>	(2,742)	
<b>Investimentos</b>	<b><u>R\$ 11,872</u></b>	<b>32%</b>
Edificações e equipamentos	4,525	
Agências de Fomento	7,347	
<b>Resultado do período</b>	<b><u>R\$ (1,264)</u></b>	

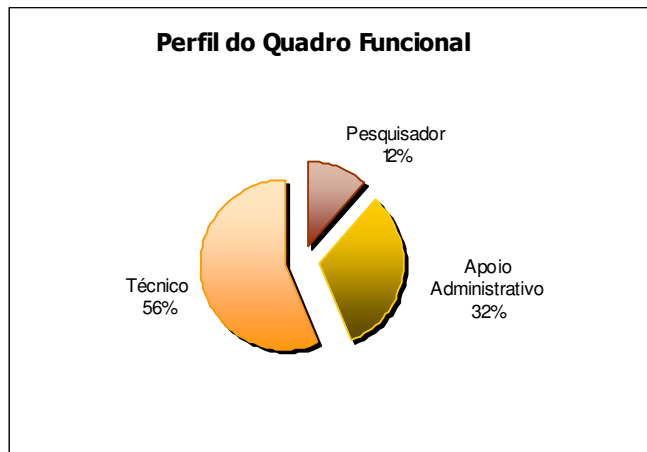
<sup>a</sup> Recursos destinados a construção de equipamentos classificados como Investimentos

**Tabela 17: Demonstração das receitas e despesas do período**

Os gastos com pessoal durante o ano de 2005 representaram 32% dos recursos totais recebidos no período.

O gráfico 16 mostra o perfil do quadro funcional da ABTLuS. O LNLS, em 31 de dezembro de 2005, tem 207 colaboradores (funcionários, servidor público cedido e pesquisadores associados), sendo que aproximadamente metade é composto por técnicos e engenheiros, indicando a forte característica de desenvolvimento de instrumentação científica.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**



**Gráfico 17: Perfil da força de trabalho**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**C. INDICADORES DE DESEMPENHO**

<b>Macro - Objetivo</b>	<b>Indicador</b>	<b>Unid.</b>	<b>Tipo</b>	<b>Peso</b>	<b>Pactuado 2005</b>	<b>Realizado 2005</b>
Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.	1. Número de horas - linha	U	D	2	43.000	38.651
	2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron	U	D	2	4.000	3.931
	3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)	%	D	3	93%	94,4%
	4. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron	%	D	3	90%	109%
	5. Horas de estudo de máquina e comissionamento	U	D	2	1.400	3092
	6. Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron	%	Uso	2	90%	91%
	7. Custo por proposta de pesquisa realizada nas instalações abertas	R\$	D	2	72.380	55.501
	8. Número de propostas realizadas nas instalações abertas	U	Uso	3	500	647
	9. Índices de satisfação dos usuários	%	D/Uso	2	85%	88%
	10. Número total de publicações	U	Uso	4	190	216
	11. Publicações em revistas com Fator de Impacto maior do que 5	U	Uso	1	11	11
Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo	12. Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS	Rz	D	2	2,5	4,4
	13. Taxa de supervisão de pós-graduados	Rz	D	2	1,5	2,3
	14. Taxa de supervisão de pós-doutores	Rz	D	3	1,0	0,9
	15. Número de memorandos técnicos disponíveis na Internet	U	Uso	2	10	9
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	16. Número de projetos de desenvolvimento tecnológico	U	D	2	7	7
	17. Número de técnicos externos treinados	U	D	1	25	23
	18. Número de pesquisadores externos treinados	U	D	3	250	249
	19. Horas de treinamento por funcionário	U	D	1	20	40
	20. Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão	%	D	2	40%	59%

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**1. Número de horas linhas**

Previsto: 43.000 horas linhas

Realizado: 38.651 horas linhas

O Indicador número de horas linhas refere-se ao produto obtido do total de linhas em operação por horas de feixe destinados aos usuários de luz síncrotron.

Em 2005 foram fornecidas 3.931 horas de feixe para usuários de luz síncrotron. A linha SGM não operou nos 9 primeiros meses do ano devido a manutenção de seus elementos ópticos e a linha XRL foi desativada por baixa demanda, resultando em cumprimento parcial da meta pactuada.

<b>Período</b>	<b>Horas de operação</b>	<b>Linhas em operação</b>	<b>Total de horas linhas</b>
Janeiro	330	10	3300
Fevereiro	275	10	2750
Março	0	10	0
Abril	0	10	0
Maio	444	10	4440
Junho	464	10	4640
Julho	434	10	4340
Agosto	474	10	4740
Setembro	369	10	3690
Outubro	458	11	5038
Novembro	458	11	5038
Dezembro	225	3	675
<b>Total</b>			<b>38651</b>

**Fórmula de cálculo:** [Linhas de luz \* total de horas de feixe]

**2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron**

Previsto: 4.000 horas

Realizado: 3.931 horas

No ano de 2005 foram fornecidas 3931 horas de feixe aos usuários (98% da meta pactuada), sendo que 3.806 foram durante os turnos programados e 125 horas

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

em turnos extraordinários. A fonte de luz síncrotron operou em regime contínuo nos períodos de janeiro-fevereiro e maio-novembro no modo *multi-bunch*, e no mês de dezembro no modo *single-bunch* (pacote único) para os usuários das linhas de luz SXS, TGM e SGM. Um acidente de vácuo em setembro foi o principal responsável pela pequena diminuição do número de horas em relação ao pactuado.

### ***Fórmula de cálculo:***

[número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron]

### **3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)**

Previsto: 93%

Realizado: 94,4%

A baixa confiabilidade durante o mês de janeiro foi um reflexo das várias intervenções de vácuo realizadas na parada do final de 2004. Em setembro um acidente de vácuo comprometeu a confiabilidade. Ao longo dos turnos de operação a confiabilidade acompanhou a melhora das condições de vácuo do anel de armazenamento, resultando num índice de confiabilidade de 94,4%, índice acima do pactuado para o ano. Ver gráfico 02.

### ***Fórmula de cálculo:***

[horas entregues no tempo programado/horas previstas X 100]

### **4. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron**

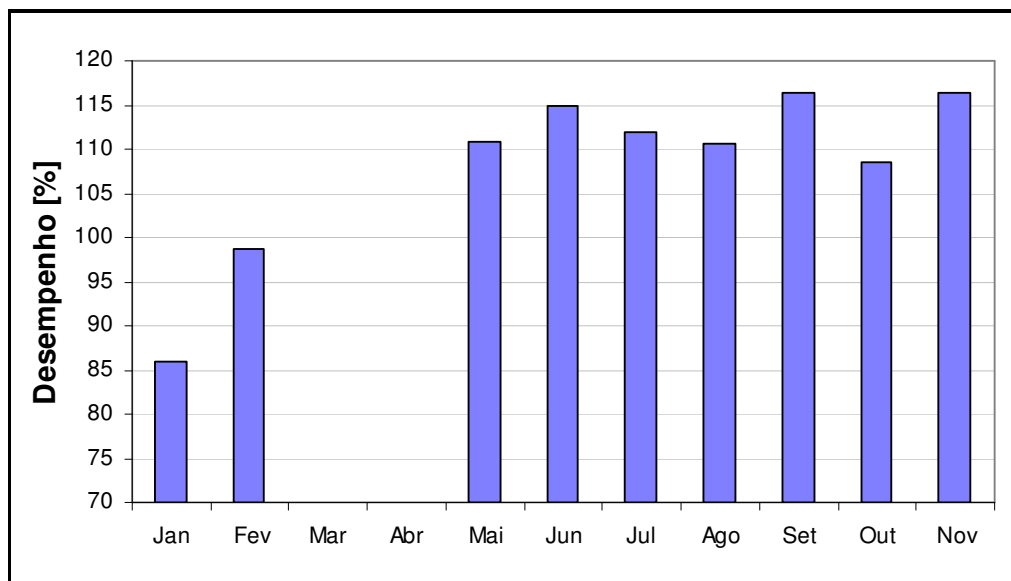
Previsto: 90%

Realizado: 109%

O baixo desempenho da fonte de luz síncrotron nos primeiros meses do ano foi consequência das intervenções de vácuo realizadas no final de 2004, que tiveram reflexos negativos sobre a corrente inicial e o tempo de vida do feixe de elétrons. A evolução das condições de vácuo do anel de armazenamento refletiu diretamente no

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

índice de desempenho que, em maio, atingiu a média do indicador de 2004. Outubro apresentou um desempenho atípico em função de um acidente de vácuo ocorrido em uma das linhas de luz e que afetou as condições de vácuo do anel. Nos demais meses, ainda que com as flutuações decorrentes das condições normais de operação da fonte, o desempenho manteve-se sempre acima da média do ano.



**Gráfico 18: Desempenho da fonte de luz síncrotron durante operação para usuários em 2005.**

O índice de desempenho é medido pela média ponderada de três parâmetros operacionais do anel de armazenamento: 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 dado um valor referencial e um peso, o percentual de realização deste parâmetro determina o indicador de desempenho.

**Memória de Cálculo:**

Parâmetro Operacional	Desempenho	Valor Nominal	Peso
Corrente Inicial Média	236 mA	250	3
Corrente Média	169 mA	163	5
Tempo de Vida Médio	18,1 h	10	1

**Ind. 4:  $\{[(236/250)*3] + [(169/163)*5] + [(18,1/10)*1]\} / 3+1+5 = 109\%$**

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

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

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

onde  $I_i$  é a corrente média no início dos turnos de usuários,  $\tau$  é o tempo de vida médio em turnos de usuários e  $I_{av}$  é a corrente média ao longo dos turnos de usuários. Os parâmetros  $I_{i0}$ ,  $\tau_0$ ,  $I_{av0}$  são valores de referência e  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são os respectivos pesos. Os valores numéricos são:

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

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

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

e os pesos são:

$$\alpha = 3$$

$$\beta = 1$$

$$\gamma = 5$$

### **Fórmula de cálculo:**

{[(Corrente Inicial Média/Corrente Inicial Média Nominal)\*3] + [(Tempo de Vida Médio/Tempo de Vida Médio Nominal)\*1] + [(Corrente Média/Corrente Média Nominal)\*5]} / (3+1+5) \*100 =%

### **5. Horas de estudo de máquina e comissionamento**

Previsto: 1.400 horas

Realizado: 3.092 horas

A superação da meta ocorreu devido às várias intervenções na fonte de luz síncrotron, condicionamento da câmara de vácuo no anel de armazenamento, instalação do *wiggler* multipolar e os estudos de estabilidade de órbita exigiram



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

muitas horas de estudo de máquina e comissionamento, superando as horas previstas neste indicador.

***Fórmula de cálculo:***

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

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

Previsto: 90%

Realizado: 91%

O indicador grau de saturação considera a capacidade de ampliação do tempo de operação da fonte de luz síncrotron. O alto grau de saturação é resultante da elevada quantidade de horas dispendidas no comissionamento do anel de armazenamento e estudos de máquina.

***Memorial de Cálculo:***

<b>Uso da Fonte de Luz Síncrotron</b>	<b>Total Horas</b>
Usuários	3931 h
Injeção	189 h
Estudo de Máquina	611 h
Manutenção	547 h
Comissionamento	2481 h
Falhas	226 h
<b>Total em uso</b>	<b>7985 h</b>
Horas disponíveis	8760 h
<b>Grau de Saturação</b>	<b>91%</b>

$$\text{Ind. 6: } (3931 + 189 + 611 + 547 + 2481 + 226) / (365 \text{ d} * 24 \text{ h}) = 91\%$$

***Fórmula de cálculo:*** [(horas de máquina desligada)/total de horas no ano]

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**7. Custo por proposta de pesquisa realizada nas instalações abertas**

Previsto: R\$ 72.380

Realizado: R\$ 55.501

O indicador custo por proposta de pesquisa é obtido pelo coeficiente dos gastos totais pelo total de propostas realizadas nas instalações abertas (Linhas de Luz, Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, Laboratório de Microscopia Eletrônica, Laboratório de Força Atômica e Tunelamento, Laboratório de Microfabricação e Laboratório Espectroscopia de Massas).

**Fórmula de cálculo:** [Gastos totais/indicador 8]

**8. Número de propostas realizadas nas instalações abertas**

Previsto: 500 propostas de pesquisas

Realizado: 647 propostas de pesquisas

Foram realizadas 647 propostas de pesquisas nas instalações abertas do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, sendo 423 propostas nas linhas de luz, 138 no Laboratório de Microscopia Eletrônica, 6 no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, 19 no Laboratório de Microfabricação, 19 no Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento e 42 no Laboratório de Espectrometria de Massas.

**Fórmula:** [Números de propostas realizadas]

**9. Índice de satisfação dos usuários**

Previsto: 85%

Realizado: 88%

O indicador de satisfação dos usuários foi obtido a partir do questionário do “ombudsman” respondido pelos usuários da infra-estrutura do LNLS.

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS** **Relatório Anual de 2005**

Para o ano de 2006, por recomendação da Comissão de Acompanhamento e Avaliação do Contrato de Gestão, foi implementado, em meados de maio de 2005, pesquisa de opinião com os usuários durante a realização dos experimentos.

A primeira prévia realizada contou com a participação de 80 propostas, dentre um total de 366 propostas realizadas nas linhas de luz, no período de maio a dezembro de 2005, tendo sido obtido o índice de 96% de satisfação dos usuários. No questionário elaborado pelo LNLS foram destacados os itens: qualidade da linha de luz, qualidade do anel de armazenamento, atendimento/suporte recebido e acesso a laboratórios de preparação de amostras.

### ***Fórmula de cálculo:***

{[(Dentro do esperado e/ou Além do esperado nos itens Qualidade e Apoio Técnico)\*peso]+[Dentro do esperado e/ou Além do esperado no item Qualidade do Apoio Administrativo)\*peso]/dividido pelo total de entrevistados.

### **10. Número total de publicações**

Previsto: 190 publicações em periódicos indexados

Realizado: 216 publicações em periódicos indexados

Consta no bando de dados da produção bibliográfica do Laboratório cerca de 216 artigos publicados em periódicos indexados pelo *Institute For Scientific Information/Thomson Scientific - ISI*. A atualização do banco de dados da produção bibliográfica foi intensificada em meados de 2006, com pesquisa na base do Currículo Lattes do CNPq e correspondência eletrônica a todos os usuários das instalações abertas.

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

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**11. Publicações em revistas com Fator Impacto maior do que 5**

Previsto: 11 artigos em periódicos indexados

Realizado: 11 artigos em periódicos indexados

Este é um novo indicador pactuado para o ano de 2005. Das 216 publicações em periódicos indexados, 11 artigos possuem fator de impacto superior a 5. É utilizado a indexação do periódico e seu fator de impacto determinado pelo “*Institute of Scientific Information -ISI*”.

**Fórmula de cálculo:** [publicações em revista cujo fator de impacto maior do que 5]

**12. Publicações resultantes por pesquisador da ABTLuS**

Previsto: 2,5 artigos por pesquisador interno

Realizado: 4,4 artigos por pesquisador interno

Durante 2005 foram publicados 93 artigos em periódicos indexados por pesquisadores da ABTLuS. Para efeito de cálculo do indicador, considera-se o artigo em periódicos indexados que tenha o nome do pesquisador da ABTLuS, como um dos autores.

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

**13. Taxa de Supervisão de pós-graduados**

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

Realizado: 2,3 pós-graduando sob orientação por pesquisador

## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS** **Relatório Anual de 2005**

Estiveram sob orientação, no período, 49 alunos de pós-graduação, sendo 43 bolsista de doutorado e 6 bolsista de mestrado. O indicador é obtido pela razão dos pós-graduandos orientados pelo número de pesquisadores vinculados à Instituição.

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

### **14. Taxa de Supervisão de pós-doutores**

Previsto: 1,0 pós-doutores supervisionados

Realizado: 0,9 pós-doutores supervisionados

Estiveram sob supervisão, no período, 18 pós-doutores. O indicador é obtido pela razão dos pós-doutores supervisionados pelo número de pesquisadores vinculados à ABTLuS. Pelo Programa de Pós-doutoramento da ABTLuS iniciado em junho de 2005 foi contratado um profissional para dar apoio em atividades de apoio à operação das instalações experimentais e de apoio aos usuários e desenvolvimento de programa próprio de pesquisa, por um período de dois anos, podendo ser prorrogado por mais três anos.

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

### **15. Números de Memorandos Técnicos disponíveis na internet**

Previsto: 10 memorandos técnicos

Realizado: 9 memorandos técnicos

Foram produzidos 9 memorandos técnicos durante o ano de 2005. Os memorandos técnicos são instrumentos importantes de divulgação da produção técnica qualificada. Esse indicador visa incentivar e medir a documentação produzida internamente, além de tornar o conhecimento público.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

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

**16. Número de projetos de desenvolvimento tecnológico**

Previsto: 7 projetos de desenvolvimento tecnológico

Realizado: 7 projetos de desenvolvimento tecnológico

As interações com o Setor Industrial durante o ano de 2005, resultaram no desenvolvimento tecnológicos com as seguintes empresas: GETEC, HP, NOVOFILME, BOSCH, D&L, OXITENO e CENPES-PETROBRÁS, explicitadas no Programa 5.

**Fórmula de cálculo:** [Total de projetos realizados]

**17. Número de técnicos externos treinados**

Previsto: 25 técnicos treinados

Realizado: 23 técnicos treinados

Em 2005 foram treinados 23 estagiários, sendo 10 de nível médio e 13 de nível superior.

**Fórmula de cálculo:** [Número de técnicos treinados]

**18. Número de pesquisadores externos treinados**

Previsto: 250 pesquisadores treinados

Realizado: 249 pesquisadores treinados

Durante o ano de 2005 foram realizados 6 cursos, 1 workshop e 1 oficina para um total de 249 participantes.

**Fórmula de cálculo:** [Número de pesquisadores externos treinados]

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**19 – Horas de treinamento por funcionário**

Previsto: 20 horas por funcionário

Realizado: 40 horas por funcionário

Durante o primeiro semestre de 2005 foram realizadas 8.239 horas de treinamento para uma força de trabalho de 207 pessoas. Não foram computadas, para efeito de cálculo do indicador, as horas de treinamento interno relacionadas a Segurança do Trabalho, exigida de todo quadro de funcionários, por tratar de treinamento interno, cujo escopo é a segurança no local de trabalho.

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

**20 – Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão**

Previsto: 40% de alavancagem

Realizado: 59% de alavancagem

Os recursos do Contrato de Gestão recebidos no ano de 2005 totalizaram R\$ 22.557 milhões, sendo que R\$ 855 mil como restos a pagar referentes ao orçamento de 2004. Os recursos de agência de fomento, receitas de aplicações financeiras, vendas e outras fontes, foram de R\$ 13.396 milhões, resultando na alavancagem de 59%.

**Fórmula de cálculo:** [recursos de outras fontes/recursos do contrato de gestão]

## CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005

### D. CONCLUSÃO

Em 2005 o LNLS manteve seu nível de atividades e desenvolvimento. Os trabalhos como laboratório aberto, multi-usuário foram intensificados, realizando 647 propostas de pesquisa, com a publicação de 216 artigos científicos em periódicos indexados. O principal incremento de propostas ocorreu nas linhas de luz e na espectrometria de massas, sendo que este último operou pela primeira vez durante todo o ano, apesar das dificuldades encontradas com o aparelho Maldi-TOF-TOF que teve que ser substituído.

Ressaltamos a continuação dos esforços na construção das linhas de luz, procurando sempre ampliar a capacidade experimental instalada. Embora não tenha sido aberta nenhuma linha de luz nova para usuários, em 2005 foi concluída as linhas de espalhamento de raios-X a baixos ângulos e de fluorescência no visível e ultravioleta para biologia e química. Ambas as linhas de luz encontram-se em fase final de comissionamento. Além disso, a construção das linhas de cristalografia de proteínas por técnica MAD e a segunda linha de absorção de raios-X avançaram e o comissionamento de ambas as linhas será iniciado em breve. As atividades na linha de litografia por raios-X foram encerradas. Esta linha não vinha apresentando usuários nos últimos anos e não havia perspectiva de alteração deste cenário. Com isto, tivemos 11 linhas de luz operando para usuários e esperamos ter 15 em operação em 2006.

Um dos pontos alto do ano foi a instalação do *wiggler* e seu comissionamento. A instalação, bem sucedida, do primeiro dispositivo de inserção no LNLS permitirá a instalação da linha de luz de cristalografia de proteínas com técnica MAD, um salto qualitativo nos estudos pós-genômicos no Brasil. A conclusão da nova blindagem no anel de armazenamento também deve ser destacada. Atualmente, medidas estão sendo realizadas e os resultados são promissores no sentido de liberar o Hall experimental para o público inclusive durante os períodos de injeção de elétrons, permitindo um trabalho contínuo nas linhas de luz.

Foram adquiridos os novos microscópios eletrônicos e a construção do prédio César Lattes foi iniciada. O projeto do prédio foi detalhado e a contratação da construção do mesmo está encaminhada.



## **CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2005**

Na área de biologia estrutural, foram adquiridos dois *robôs* de cristalização. Espera-se que, com a automatização do processo de cristalização de proteínas, aumente-se a eficiência deste processo, um dos gargalos no estudo das proteínas. As redes de biologia molecular estrutural, estadual e nacional, encontram-se nas suas fases finais e em 2006 será o ano para buscar um novo formato de continuidade destes trabalhos.

A interação com a indústria tem sido intensificada. Além da consolidação dos projetos já em andamento, foi iniciada uma interação com o CENPES-Petrobras na área de catálise. Este novo projeto deverá ser ampliado em 2006.

Finalmente, em 2005 foi realizado o planejamento estratégico do LNLS, como parte dos trabalhos de planejamento das Unidades de Pesquisa do MCT, e que servirá de base para a renovação do Contrato de Gestão entre a ABTLuS e o MCT por um novo período de 4 anos.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**E. APÊNDICES**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**E.1 Publicações**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

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

<sup>1</sup> *In silico identification of potential chaperone genes that belong to type III and type IV secretion systems in *Xanthomonas axonopodis* pv *citri** 1482

Khater, L., Santos, T. M., Alegria, M. C., Docena, C., Silva, A. C. R. da, Ramos, C. H. I.

**Genetics and Molecular Biology, 28: 321-7 (2005)**

<sup>2</sup> *Mapping contacts between regulatory domains of skeletal muscle TnC and TnI by analyses of single-chain chimeras* 1489

Tirolí, A. O., Tasic, L., Oliveira, C. L. P., Bloch Jr., C., Torriani, I., Farah, C. S., Ramos, C. H. I.

**FEBS Letters, 272: 779-90 (2005)**

<sup>3</sup> *Linear and circularly polarized light to study anisotropy and resonant scattering in magnetic thin films* 1515

Tolentino, H. C. N., Cezar, J. C., Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y.

**Journal of Synchrotron Radiation, 12: 168-76 (2005)**

<sup>4</sup> *Short-range charge order in RNiO<sub>3</sub> perovskites (R=Pr, Nd, Eu, Y) probed by X-ray-absorption spectroscopy* 1516

Piamonteze, C., Tolentino, H. C. N., Ramos, A. Y., Massa, N. E., Alonso, J. A., Martinez-Lope, M. J., Casais, M. T.

**Physical Review B, 71: 012104-1-4 (2005)**

<sup>5</sup> *Spin-orbit-induced mixed-spin ground state in RNiO<sub>3</sub> perovskites probed by X-ray absorption spectroscopy: insight into the metal-to-insulator transition* 1517

Piamonteze, C., de Groot, F. M. F., Tolentino, H. C. N., Ramos, A. Y., Massa, N. E., Alonso, J. A., Martinez-Lope, M. J.

**Physical Review B, 71: 020406-1-4 (2005)**

<sup>6</sup> *On the difference in stability between horse and sperm whale myoglobins* 1528

Regis, W. C. B., Fattori, J., Santoro, M. M., Jamin, M., Ramos, C. H. I.

**Archives of Biochemistry and Biophysics, 436: 168-77 (2005)**

<sup>7</sup> *Circular permutation and deletion studies of myoglobin indicate that the correct position of its N-terminus is required for native stability and solubility but not for native-like heme binding and folding* 1530

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Ribeiro-Júnior, E. A., Ramos, C. H. I.

**Biochemistry, 44: 4699-4704 (2005)**

<sup>8</sup> *Low resolution structural study of two human HSP-40 chaperones in solution* <sup>1534</sup>

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

**Journal of Biological Chemistry, 280: 13671-81 (2005)**

<sup>9</sup> *Protein folding, misfolding and aggregation: evolving concepts and conformational diseases* 1535

Ramos, C. H. I., Ferreira, S. T.

**Protein and Peptide Letters, 12: 213-22 (2005)**

<sup>10</sup> *Protein folding assisted by chaperones* <sup>1536</sup>

Borges, J. C., Ramos, C. H. I.

**Protein and Peptide Letters, 12: 257-61 (2005)**

<sup>11</sup> *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of NADPH-dependent thioredoxin reductase I from *Saccharomyces cerevisiae** 1539

Oliveira, M. A., Discola, K. F., Alves, S. V., Barbosa, J. A. R. G., Medrano, F. J., Soares Netto, L. E., Guimarães, B. G.

**Acta Crystallographica F, 61: 387-90 (2005)**

<sup>12</sup> *Elastic energy mapping of epitaxial nanocrystals* <sup>1543</sup>

Medeiros-Ribeiro, G., Malachias, A., Kycia, S. W., Paniago, R.M., Kamins, T. I., Stanley Williams, R.

**Applied Physics A - Materials, 80: 1211-4 (2005)**

<sup>13</sup> *Probing the pH-dependent structural features of alpha-KTx12,1, a potassium channel blocker from the scorpion *Tityus serrulatus** 1551

Oyama, S.T., Pristovsek, P., Franzoni, L., Pertinhez, T. A., Schinina, E., Lucke, C., Ruterjans, H., Arantes, E. C., Spisni, A.

**Protein Science, 14: 1025-38 (2005)**

<sup>14</sup> *The micelle-bound structure of an antimicrobial peptide derived from the alpha-chain of bovine hemoglobin isolated from the tick *Boophilus microplus** 1552

Sforça, M. L., Machado, A., Figueredo, R. C. R., Oyama, S.T., Silva, F. C., Miranda, A., Daffre, S., Miranda, M. T. M., Spisni, A., Pertinhez, T. A.

**Biochemistry, 44: 6440-51 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>15</sup> *X-ray method to study temperature-dependent stripe domains in MnAs/GaAs* <sup>1555</sup>

Paniago, R.M., Coelho, L. N., Neves, B. R. A., Westfahl Jr., H., Iikawa, F., Daweritz, L., Spezzani, C., Sacchi, M.

**Applied Physics Letters, 86: 053112-1-3 (2005)**

<sup>16</sup> *Advances on the Brazilian toroidal grating monochromator (TGM) beamline* <sup>1562</sup>

Cavasso-Filho, R. L., Homem, M. G. P., Landers, R., Brito, A. N. de

**Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 144-147: 1125-7 (2005)**

<sup>17</sup> *Expression and spectroscopic analysis of a mutant hepatitis B virus onco-protein HBx without cysteine residues* <sup>1569</sup>

Rui, E., Moura, P. R. de, Gonçalves, K. de A., Kobarg, J.

**Journal of Virological Methods, 126: 65-74 (2005)**

<sup>18</sup> *Dipolar interaction and size effects in powder samples of colloidal iron oxide nanoparticles* <sup>1594</sup>

Vargas, J. M., Socolovsky, L.M., Knobel, M., Zanchet, D.

**Nanotechnology, 16: S285-90 (2005)**

<sup>19</sup> *Debye-Waller factor study of Co, Cu and CoCu granular alloy* <sup>1601</sup>

Cezar, J. C., Abreu, N. P., Tolentino, H. C. N.

**Physica Scripta, T115: 418-20 (2005)**

<sup>20</sup> *Evolution of Ni local structure in NdNiO<sub>3</sub> Perovskite across the metal-insulator transition* <sup>1602</sup>

Piamonteze, C., Tolentino, H. C. N., Ramos, A. Y., Massa, N. E., Alonso, J. A., Casais, M. T.

**Physica Scripta, T115: 648-50 (2005)**

<sup>21</sup> *Local structure in LaMnO<sub>3</sub> across the Jahn-Teller transition* <sup>1603</sup>

Souza, R. A. de, Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Granado, E.

**Physica Scripta, T115: 428-30 (2005)**

<sup>22</sup> *Local structure in strained manganite thin films* <sup>1604</sup>

Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N., Favre-Nicolind, E., Ranno, L.

**Physica Scripta, T115: 589-90 (2005)**

<sup>23</sup> *The dispersive X-ray absorption spectroscopy beamline at LNLS* <sup>1605</sup>

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Tolentino, H. C. N., Cezar, J. C., Watanabe, N., Piamonteze, C., Souza Neto, N. M., Tamura, E., Ramos, A. Y., Neuenschwander, R. T.

**Physica Scripta, T115: 977-9 (2005)**

<sup>24</sup> *XAS and XRD studies on the structural changes of Ni-Raney catalyst after a hydrogenation process* 1606

Watanabe, N., Ramos, A. Y., Ferreira, J. A. M., Tolentino, H. C. N.

**Physica Scripta, T115: 727-8 (2005)**

<sup>25</sup> *High resolution, large spectral range, in variable-included-angle soft X-ray monochromators using a plane VLS grating* 1616

Reininger, R., Castro, A. R. B.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 538: 760-70 (2005)**

<sup>26</sup> *Strong orbital correlations in a Fe-substituted spin-glass-manganite* 1644

Granado, E., Urbano, R. R., Perez, C. A., Azimonte, C., Lynn, J. W., Souza, R. A. de, Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Bychkov, G. L., Shiryaev, S. V., Barilo, S. N.

**Physical Review B, 72: 052406-1-4 (2005)**

<sup>27</sup> *Identification and in silico expression pattern analysis of Eucalyptus expressed sequencing tags (ESTs) encoding molecular chaperones* 1652

Cagliari, T. C., Tiroli, A. O., Borges, J. C., Ramos, C. H. I.

**Genetics and Molecular Biology, 28(suppl.): 520-8 (2005)**

<sup>28</sup> *Strain effect on the tilt angle in manganite thin films* 1667

Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Tolentino, H. C. N.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 238: 259-63 (2005)**

<sup>29</sup> *Real-time atomic resolution study of metal nanowires* 1713

Bettini, J., Rodrigues, V., Gonzalez, J. C., Ugarte, D.

Applied Physics A - Materials, 81: 1513-8 (2005)

<sup>30</sup> *Photoabsorption and photoionization studies of the amino acid proline in the VUV region* 1725

Coutinho, L. H., Homem, M. G. P., Cavasso-Filho, R. L., Marinho, R. R. T., Lago, A. F., Souza, G. G. B. de, Brito, A. N. de

**Brazilian Journal of Physics, 35: 940-4 (2005)**

<sup>31</sup> *Experiências simultâneas de espalhamento de raios-X e calorimetria diferencial de* 1764

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

*varredura (SAXS/WAXD/DSC) com resolução temporal utilizando radiação síncrotron*

Plivelíc, T., Cassu, S. N., Gonzalez, M. C., Torriani, I.

**Polímeros: Ciência e Tecnologia, 15: 199-206 (2005)**

<sup>32</sup> *Differential effects of uncharged aminoamide local anesthetics on phospholipid bilayers, as monitored by <sup>1</sup>H-NMR measurements* 1567

Fraceto, L. F., Spisni, A., Schreier, S., Paula, E.

**Biophysical Chemistry, 115: 11-18 (2005)**

<sup>33</sup> *Photoelectron diffraction studies of Cu on Pd(111) random surface alloys* 1575

Siervo, A. de, Soares, E. A., Landers, R., Kleiman, G. G.

**Physical Review B, 71: 115417-1-7 (2005)**

<sup>34</sup> *Growth study of Cu/Pd(1 1 1) by RHEED and XPS* 1576

Siervo, A. de, Paniago, R.M., Soares, E. A., Pfannes, H.-D., Landers, R., Kleiman, G. G.

**Surface Science, 575: 217-22 (2005)**

<sup>35</sup> *Heparin-binding sites in granulocyte-macrophage colony-stimulating factor* 1622

Sebollela, A., Cagliari, T. C., Limaverde, G. S. C. S., Chapeaurouge, A., Sorgine, M. H., Coelho-Sampaio, T., Ramos, C. H. I., Ferreira, S. T.

**Journal of Biological Chemistry, 280: 31949-56 (2005)**

<sup>36</sup> *Getting the most out of X-ray home sources* 1653

Nagem, R. A. P., Ambrósio, R. C., Rojas, A. L., Navarro, M. V. A. S., Golubev, A. M., Garratt, R. C., Polikarpov, I.

**Acta Crystallographica D, 61: 1022-30 (2005)**

<sup>37</sup> *Structural and morphological characterization of hemozoin produced by Schistosoma mansoni and Rhodnius prolixus* 1676

Oliveira, M. F., Kycia, S. W., Gomez, A., Kosar, A. J., Bohle, D. S., Hempelmann, E., Menezes, D., Vannier-Santos, M. A., Oliveira, P. L., Ferreira, S. T.

**FEBS Letters, 579: 6010-6 (2005)**

<sup>38</sup> *Adsorption of phosphoric acid on niobium oxide coated cellulose fiber: preparation, characterization and ion exchange property* 1678

Pavan, F. A., Francisco, M. S. P., Landers, R., Gushikem, Y.



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**Journal of Brazilian Chemical Society, 16: 815-20 (2005)**

<sup>39</sup> *Computer simulations of gold nanowire formation: the role of outlayer atoms* <sup>1716</sup>

Sato, F., Moreira, A. S., Coura, P. Z., Dantas, S. O., Legoas, S. B., Ugarte, D., Galvao, D. S.

**Applied Physics A - Materials, 81: 1527-31 (2005)**

<sup>40</sup> *Comment on "Contaminants in suspended gold chains: an Ab initio molecular dynamics study" – Reply* <sup>1717</sup>

Legoas, S. B., Rodrigues, V., Ugarte, D., Galvao, D. S.

**Physical Review Letters, 95: 169602-1 (2005)**

<sup>41</sup> *Expression, purification, and characterization of rat protein tyrosine phosphatase n catalytic domain* <sup>1728</sup>

Santos, M. A. M., Santos, S. M., Matozo, H. C., Portugal, R. V., Iuliano, R., Fusco, A., Polikarpov, I.

**Protein Expression & Purification, 41: 113-20 (2005)**

<sup>42</sup> *Molecular dynamics simulations reveal multiple pathways of ligand dissociation from thyroid hormone receptors* <sup>1729</sup>

Martinez, L., Sonoda, M. T., Webb, P., Baxter, J. D., Skaf, M. S., Polikarpov, I.

**Biophysical Journal, 89: 2011-23 (2005)**

<sup>43</sup> *Structural insights into the Betha-xylosidase from Trichoderma reesei obtained by synchrotron small-angle X-ray scattering and circular dichroism spectroscopy* <sup>1730</sup>

Rojas, A. L., Fischer, H., Eneiskaya, E. V., Kulminskaya, A. A., Shabalin, K. A., Neustroev, K. N., Craievich, A. F., Golubev, A. M., Polikarpov, I.

**Biochemistry, 44: 15578-84 (2005)**

<sup>44</sup> *Acid- and pressure-induced (un) folding of yeast glutathione reductase: competition between protein oligomerization and aggregation* <sup>1731</sup>

Morais, A. C. S., Chapeaurouge, A., Ferreira, S. T.

**International Journal of Biochemistry & Cell Biology, 37: 1890-9 (2005)**

<sup>45</sup> *Activation of GABAA receptor by taurine and muscimol blocks the neurotoxicity of Betha-amyloid in rat hippocampal and cortical neurons* <sup>1732</sup>

Paula-Lima, A. C., De Felice, F. G., Brito-Moreira, J., Ferreira, S. T.

**Neuropharmacology, 49: 1140-8 (2005)**

<sup>46</sup> *Peptide blockers of the inhibition of neuronal nicotinic acetylcholine receptors by amyloid B(Beta)* <sup>1734</sup>

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Magdesian, M. H., Nery, A. A., Martins, A. H. B., Juliano, M. A., Juliano, L., Ulrich, H., Ferreira, S. T.

**Journal of Biological Chemistry, 280: 31085-90 (2005)**

47 *Stabilization of partially folded states in protein folding/misfolding transitions by hydrostatic pressure* 1735

Ferreira, S. T., Chapeaurouge, A., De Felice, F. G.

**Brazilian Journal of Medical and Biological Research, 38: 1215-22 (2005)**

48 *Crystal structure and low-temperature physical properties of R3M4Sn13 (R=Ce, La; M=Ir, Co) intermetallics* 1736

Israel, C., Bittar, E. M., Agüero, O. E., Urbano, R. R., Rettori, C., Torriani, I., Pagliuso, P. G., Moreno, N. O., Thompson, J. D., Hundley, M. F., Sarrao, J. L., Borges, H. A.

**Physica B - Condensed Matter, 359-361: 251-3 (2005)**

49 *Drug loading to lipid-based cationic nanoparticles* 1737

Cavalcanti, L. P., Konovalov, O., Torriani, I., Haas, H.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 238: 290-3 (2005)**

50 *Phase coexistente regimes in La0.325Pr0.300Ca0.375MnO3* 1739

Quintero, M., Leyva, A. G., Levy, P., Parisi, F., Agüero, O. E., Torriani, I., Virgens, M. G. das, Ghivelder, L.

**Physica B - Condensed Matter, 354: 63-6 (2005)**

51 *Co(II) porphyrin adsorbed on SiO2/SnO2/phosphate prepared by the sol-gel method application in electroreduction of dissolved dioxygen* 1740

Cardoso, W. S., Francisco, M. S. P., Landers, R., Gushikem, Y.

**Electrochimica Acta, 50: 4378-84 (2005)**

52 *Heterometallic manganese/zinc-phytate complex as a model compound for metal storage in wheat grains* 1741

Rodrigues-Filho, U. P., Vaz Jr., S., Felicissimo, M. P., Scarpellini, M., Cardoso, D., Vinhas, R. C. G., Landers, R., Schneider, J. F., McGarvey, B. R., Andersen, M. L., Skibsted, L. H.

**Journal of Inorganic Biochemistry, 99: 1973-82 (2005)**

53 *Modification of electrode materials for plasma torches* 1742

Jankov, I. R., Szente, R. N., Goldman, I. D., Carreño, M. N. P., Valle, M. A., Behar, M., Costa, C. A. R., Galembeck, F., Landers, R.

**Surface and Coatings Technology, 200: 254-7 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

- 54 *Dependence of transition probabilities for non-linear photo-ionization of He atoms on the structure of the exciting radiation pulses* 1743

Castro, A. R. B., Moeller, T, Wabnitz, H., Laarmann, T.

**Brazilian Journal of Physics, 35: 632-5 (2005)**

- 55 *Emission of thermally activated electrons from rare gas clusters irradiated with intense VUV light pulses from a free electron laser* 1744

Laarmann, T., Rusek, M., Wabnitz, H., Schulz, J., Castro, A. R. B., Gurtler, P., Laasch, W., Moller, T.

**Physical Review Letters, 95: 063402-1-4 (2005)**

- 56 *Photoionization of helium atoms irradiated with intense vacuum ultraviolet free-electron laser light. Part I. Experimental study of multiphoton and single-photon processes* 1745

Laarmann, T., Castro, A. R. B., Gurtler, P., Laasch, W., Schulz, J., Wabnitz, H., Möller, T.

**Physical Review A, 72: 023409-1-8 (2005)**

- 57 *Photoionization of helium atoms irradiated with intense vacuum ultraviolet free-electron laser light. Part II. Theoretical modeling of multi-photon and single-photon processes* 1746

Castro, A. R. B., Laarmann, T., Schulz, J., Wabnitz, H., Möller, T.

**Physical Review A, 72: 023410-1-9 (2005)**

- 58 *The effect of nanocrystal surface structure on the luminescence properties: photoemission study of HF-etched InP nanocrystals* 1747

Möller, T. , Adam, S., Talapin, D. V., Borchert, H., Lobo, A., McGinley, C., Castro, A. R. B., Haase, M., Weller, H.

**Journal of Chemical Physics, 123: 084706-1-10 (2005)**

- 59 *Liquid carbon, carbon-glass beads, and the crystallization of carbon nanotubes* 1509

Heer, W. A., Poncharal, P., Berger, C., Gezo, J., Song, Z., Bettini, J., Ugarte, D.

**Science, 307: 907-10 (2005)**

- 60 *Identification of new protein-protein interactions involving the products of the chromosome- and plasmid-encoded type IV secretion loci of the phytopathogen Xanthomonas axonopodis pv. Citri* 1531

Alegria, M. C., de Souza, D. P., Andrade, M. O., Docena, C., Khater, L., Ramos, C. H. I., Silva, A. C. R. da, Farah, C. S.

Journal of Bacteriology, 187: 2315-25 (2005)

- 61 *Synthesis, characterization, and biological activity of a new palladium(II) complex with deoxyalliin* 1540

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Corbi, P. P., Massabni, A. C., Moreira, A. G., Medrano, F. J., Jasiulionis, M. G., Costa-Neto, C. M.

**Canadian Journal of Chemistry, 83: 104-9 (2005)**

<sup>62</sup> *Targeting to C-terminal myosin heavy chain may explain mechanotransduction involving focal adhesion kinase in cardiac myocytes* 1545

Fonseca, P. M., Inoue, R. Y., Kobarg, C. B., Crosara-Alberto, D. P., Kobarg, J., Franchini, K. G.

**Circulation Research, 96: 73-81 (2005)**

<sup>63</sup> *Tailoring perpendicular exchange bias in [Pt/Co]-IrMn multilayers* 1546

Sort, J., Baltz, V., Garcia, F., Rodmacq, B., Dieny, B.

**Physical Review B, 71: 054411-1-7 (2005)**

<sup>64</sup> *Effect of a magnetic field on the magnetostructural phase transition of MnAs films on GaAs* 1547

Iikawa, F., Knobel, M., Santos, P. V., Adriano, C., Couto, O. D. D., Brasil, M. J. S. P., Giles, C., Paniago, R.M., Daweritz, L.

**Physical Review B, 71: 045319-1-6 (2005)**

<sup>65</sup> *MEF2C DNA-binding activity is inhibited through its interaction with the regulatory protein Ki-1/57* 1570

Kobarg, C. B., Kobarg, J., Crosara-Alberto, D. P., Theizen, T. H., Franchini, K. G.

**FEBS Letters, 579: 2615-22 (2005)**

<sup>66</sup> *Molecular alignment of ammonia studied by electron-ion-ion coincidence spectroscopy* 1584

Lindgren, A., Gisselbrecht, M., Burmeister, F., Brito, A. N. de, Kivimäki, A., Sorensen, S. L.

**Journal of Chemical Physics, 122: 114306-1-9 (2005)**

<sup>67</sup> *pH dependence thermal stability of a chymotrypsin inhibitor from Schizolobium parahyba seeds* 1587

Teles, R. C. L., Calderon, L. de A., Medrano, F. J., Barbosa, J. A. R. G., Guimarães, B. G., Santoro, M. M., Freitas, S. M.

**Biophysical Chemistry, 88: 3509-17 (2005)**

<sup>68</sup> *Smetic ordering in polymer liquid crystal-silica aerogel nanocomposites - studies of DSC and SAXS* 1588

Silveira, N. P. da, Ehrburger-Dolle, F., Rochas, C., Rigacci, A., Pereira, F. V., Westfahl Jr., H.

**Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 79: 579-85 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>69</sup> *Core excitation in O<sub>3</sub> localized to one of two symmetry-equivalente chemical bonds: molecular alignment through vibronic coupling* 1590

Wiesner, K, Brito, A. N. de , Sorensen, S. L., Kosugi, N., Björneholm, O.

**Journal of Chemical Physics, 122: 154303-1-5 (2005)**

<sup>70</sup> *Synthesis of In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles by thermal decomposition of a citrate gel precursor* 1614

Rey, J. F. Q., Plivelic, T. S., Rocha, A. R., Tadokoro, S. K., Torriani, I., Muccillo, E. N. S.

**Journal of Nanoparticle Research, 7: 203-8 (2005)**

<sup>71</sup> *Purification of a 6.5 kDa protease inhibitor from amazon Inga umbratica seeds effective against serine proteases of the boll weevil Anthonomus grandis* 1619

Calderon, L. de A., Teles, R. C. L., Leite, J. R. S. A., Franco, O. L., Grossi-de-Sá, M. F., Medrano, F. J., Bloch Jr., C., Freitas, S. M.

**Protein and Peptide Letters, 12: 583-7 (2005)**

<sup>72</sup> *Purification and in vitro characterization of the maltose-binding protein of the plant pathogen Xanthomonas citri* 1621

Balan, A., Souza, C. S. de, Moutran, A., Ferreira, R. C. C., Franco, C. S., Ramos, C. H. I., Ferreira, L. C. de S.

**Protein Expression & Purification, 43: 103-10 (2005)**

<sup>73</sup> *The electronic structure of free water clusters probed by Auger electron spectroscopy* 1640

Öhrwall, G., Fink, R. F., Tchapyguine, M., Ojamäe, L., Lundwall, M., Marinho, R. R. T., Brito, A. N. de, Sorensen, S. L., Gisselbrecht, M., Feifel, R., Rander, T., Lindblad, A., Schulz, J., Saethre, L. J., Martensson, N., Svensson, S., Björneholm, O.

**Review of Scientific Instruments, 76: 093703-1-6 (2005)**

<sup>74</sup> *A naturally occurring deletion in the SRY promoter region affecting the Sp1 binding site is associated with sex reversal* 1658

Assumpção, J. G., Caldas Ferraz, L. F., Benedetti, C. E.

**Journal of Endocrinological Investigation, 28:651-6 (2005)**

<sup>75</sup> *X-ray study of atomic ordering in self-assembled Ge islands grown on Si(001)* 1708

Malachias, A., Schüllli, T. U., Medeiros-Ribeiro, G., Cançado, L. G., Stoffel, M., Schmidt, O. G., Metzger, T.H., Paniago, R.M.

**Physical Review B, 72: 165315-1-9 (2005)**

<sup>76</sup> *Influence of synthetic parameters on the size, structure, and stability of dodecanethiol-stabilized silver nanoparticles* 1714

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Oliveira, M. M., Ugarte, D., Zanchet, D., Zarbin, A. J. G.

**Journal of Colloid and Interface Science, 292: 429-35 (2005)**

<sup>77</sup> *Effect of dipolar interaction observed in iron-based nanoparticles* <sup>1715</sup>

Vargas, J. M., Nunes, W. C., Socolovsky, L.M., Knobel, M., Zanchet, D.

**Physical Review B, 72: 184428-1-6 (2005)**

<sup>78</sup> *Crystallographic studies on decameric Brucella spp. lumazine synthase: a novel quaternary arrangement evolved for a new function?* 1718

Klinke, S., Zylberman, V., Vega, D., Guimarães, B. G., Braden, B. C., Goldbaum, F. A.

**Journal of Molecular Biology, 353:124-37 (2005)**

<sup>79</sup> *Crystallization and preliminary X-ray crystallographic studies of glutaredoxin 2 from Saccaromyces cerevisiae in different oxidation states* 1720

Discola, K. F., Oliveira, M. A., Silva, G. M., Barcena, J. A., Porras, P., Padilla, A., Soares Netto, L. E., Guimarães, B. G.

**Acta Crystallographica F, 61: 445-7 (2005)**

<sup>80</sup> *Nanostructure of granular Co-SiO<sub>2</sub> thin films modified by thermal treatment and its relationship with the giant hall effect* 1738

Socolovsky, L.M., Oliveira, C. L. P., Denardin, J. C., Knobel, M., Torriani, I.

**Physical Review B, 72: 184423-1-5 (2005)**

<sup>81</sup> *Magnetocaloric effect of the (Pr, Ca)MnO<sub>3</sub> manganite at low temperatures* <sup>1756</sup>

Gomes, A. M., Garcia, F., Guimarães, A. P., Reis, M. S., Amaral, V. S., Tavares, P. B.

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 290-291: 694-6 (2005)**

<sup>82</sup> *Magnetic relaxation measurements of exchange biased (Pt/Co) multilayers with perpendicular anisotropy* 1757

Romanens, F., Pizzini, S., Sort, J., Garcia, F., Camarero, J., Pennec, Y., Yokaichiya, F., Vogel, J., Dieny, B.

**European Physical Journal B, 45: 185-90 (2005)**

<sup>83</sup> *Tailoring perpendicular exchange bias in [Pt/Co]-IrMn multilayers* <sup>1758</sup>

Sort, J., Baltz, V., Garcia, F., Rodmacq, B., Dieny, B.

**Physical Review B, 71: 054411-1-7 (2005)**

<sup>84</sup> *Using exchange bias to extend the temperature range of square loop behavior in* 1759

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

*[Pt/Co] multilayers with perpendicular anisotropy*

Sort, J., Garcia, F., Auffret, S, Rodmacq, B., Dieny, B., Langlais, V., Suriñach, S., Muñoz, J. S., Baró, M. D., Nogués, J.

**Applied Physics Letters, 87: 242504-1-3 (2005)**

<sup>85</sup> *Expression, purification, crystallization and preliminary X-ray analysis of YaeQ (XAC2396) from Xanthomonas axonopodis pv. citri* 1766

Guzzo, C. R., Nagem, R. A. P., Galvão-Botton, L. M. P., Guimarães, B. G., Medrano, F. J., Barbosa, J. A. R. G., Farah, C. S.

**Acta Crystallographica F, 61: 493-5 (2005)**

<sup>86</sup> *Multiple ionization of rare gas atoms irradiated with intense VUV radiation* 1598

Wabnitz, H., Castro, A. R. B., Gurtler, P., Laarmann, T., Laasch, W., Schulz, J., Möller, T.

**Physical Review Letters, 94: 023001-1-4 (2005)**

<sup>87</sup> *Non-linear phenomena in atoms and clusters induced by intense VUV radiation from a free electron laser* 1599

Castro, A. R. B., Bostedt, C., Gurtler, P., Laarmann, T., Schulz, J., Swiderski, A., Wabnitz, H., Möller, T.

**Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 144-147: 3-6 (2005)**

<sup>88</sup> *Surface segregation in SnO<sub>2</sub>-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanopowders and effects in Mössbauer spectroscopy* 1600

Castro, R. H. R., Hidalgo, P., Coaquira, J. A. H., Bettini, J., Zanchet, D., Gouvêa, D.

**European Journal of Inorganic Chemistry, 11: 2134-8 (2005)**

<sup>89</sup> *Time-dependent strain analysis of mirrors illuminated with intense femtosecond pulses in the soft X-ray spectral range* 1615

Castro, A. R. B., Möller, T.

**Review of Scientific Instruments, 76: 063104-1-6 (2005)**

<sup>90</sup> *Optical configurations for pump and probe experiments with a VUV free-electron laser* 1617

Castro, A. R. B., Moeller, T

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 545: 568-77 (2005)**

<sup>91</sup> *Photon energy dependence of fragmentation of small argon clusters* 1726

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

Gisselbrecht, M., Lindgren, A., Tchapyguine, M., Burmeister, F., Öhrwall, G., Lundwall, M., Lundin, M., Marinho, R. R. T., Brito, A. N. de, Svensson, S., Björneholm, O., Sorensen, S. L.

**Journal of Chemical Physics, 123: 194301-1-7 (2005)**

<sup>92</sup> *Publisher's note: molecular alignment of ammonia studied by electron-ion-ion coincidence spectroscopy* 1727

Lindgren, A., Gisselbrecht, M., Burmeister, F., Brito, A. N. de, Kivimäki, A., Sorensen, S. L.

**Journal of Chemical Physics, 123: 029901-1 (2005)**

<sup>93</sup> *Magnetic relaxation of exchange biased Pt/Co multilayers studied by time-resolved Kerr microscopy* 1755

Romanens, F., Pizzini, S., Yokaichiya, F., Bonfim, M., Pennec, Y., Camarero, J., Vogel, J., Sort, J., Garcia, E., Rodmacq, B., Dieny, B.

**Physical Review B, 72: 134410-1-7 (2005)**



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**Artigo em Periódico Indexados por colaboradores e pesquisadores externos que utilizaram a infra-estrutura de pesquisa da ABTLuS.**

- <sup>1</sup> *Effect of hydrogenation on the optical and structural properties of GaAs thin films prepared by rf-magnetron sputtering* 1721

Azevedo, G. de M., Silva, J. H. D. da, Avendaño, E.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 238: 329-33 (2005)**

- <sup>2</sup> *Electrospray ionization quadrupole time-of-flight and matrix-assisted laser desorption/ionization tandem time-of-flight mass spectrometric analyses to solve micro-heterogeneity in post-translationally modified peptides from *Phoneutria nigriventer* (Aranea,* 1592

Pimenta, M. A., Rates, B., Bloch Jr., C., Gomes, P. C., Santoro, M. M., Lima, M. E., Richardson, M., Cordeiro, M. do N.

**Rapid Communications in Mass Spectrometry, 19: 31-7 (2005)**

- <sup>3</sup> *Negative differential magnetization for Ni nanoparticles in Al* 1642

Fonda, E., Teixeira, S. R., Geshev, J., Babonneau, D., Pailloux, F., Traverse, A.

**Physical Review B, 71: 184411-1-9 (2005)**

- <sup>4</sup> *Diffraction-enhanced imaging for studying pattern recognition in cranial ontogeny of bats and marsupials* 1673

Rocha, H. S., Lopes, R. T., Pessôa, L. M., Hönnicke, M. G., Tirao, G., Cusatis, C., Mazzaro, I., Giles, C.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 548: 228-33 (2005)**

- <sup>5</sup> *Diagnosis of thyroid multinodular goiter using diffraction-enhanced imaging* 1674

Rocha, H. S., Lopes, R. T., Valiante, P. M., Tirao, G., Mazzaro, I., Hönnicke, M. G., Cusatis, C., Giles, C.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 548: 175-80 (2005)**

- <sup>6</sup> *Evaluation of a synergetic effect between Rh as permanent chemical modifier and acetylacetone as complexing agent in Sc determination in sediment slurry samples by ETAAS* 1512

Flores, A. V., Perez, C. A., Arruda, M. A. Z.

**Analytica Chimica Acta, 530: 299-305 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>7</sup> *Metal-binding proteins scanning and determination by combining gel electrophoresis, synchrotron radiation X-ray fluorescence and atomic spectrometry* 1514

Verbi, F. M., Arruda, S. C. C., Rodriguez, A. P. M., Perez, C. A., Arruda, M. A. Z.

**Journal of Biochemical and Biophysical Methods, 62: 97-109 (2005)**

<sup>8</sup> *Characterization of hypoglycemic plants by total reflection X-ray fluorescence spectrometry* 1541

Zucchi, O. L. A. D., Moreira, S., de Jesus, E. F. O., Salvador, M. J.

**Biological Trace Element Research, 103: 277-90 (2005)**

<sup>9</sup> *Development of a pulsed system for ion desorption studies from polymers irradiated with multi-bunch synchrotron radiation* 1559

Rocco, M. L. M., Pontes, F. C., Farauto, G. S., Souza, G. G. B. de

**Polymer Degradation and Stability, 88: 213-6 (2005)**

<sup>10</sup> *Multi-element analysis of sea water from Sepetiba Bay, Brazil, by total reflection X-ray fluorescence spectrometry using synchrotron radiation* 1573

Costa, A. C. M., Anjos, M. J. dos, Lopes, R. T., Perez, C. A., Castro, C. R. F.

**X-Ray Spectrometry, 34: 183-8 (2005)**

<sup>11</sup> *Hydrolytic protein cleavage mediated by unusual mononuclear copper(II) complexes: X-ray structures and solution studies* 1586

Oliveira, M. C. B. de, Scarpellini, M., Neves, A., Terenzi, H., Bortoluzzi, A. J., Szpoganics, B., Greatti, A., Mangrich, A. S., Souza, E. M. de, Fernandez, P. M., Soares, M. R.

**Inorganic Chemistry, 44: 921-9 (2005)**

<sup>12</sup> *Phylloseptins: a novel class of anti-bacterial and anti-protozoan peptides from the Phyllomedusa genus* 1589

Leite, J. R. S. A., Silva, L. P., Rodrigues, M. I. S., Prates, M. V., Brand, G. D., Lacava, B. M., Azevedo, R. B., Bocca, A. L., Albuquerque, S., Bloch Jr., C.

**Peptides, 26: 565-73 (2005)**

<sup>13</sup> *Anisotropic angular distribution of Er L X-rays following photoionization by linearly polarized radiation* 1593

Barrea, R. A., Perez, C. A., Plivelic, T. S., Bonzi, E., Sánchez, H. J.

**Journal of Physics B - Atomic Molecular and Optical Physics, 38: 839-52 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>14</sup> *Enhanced contrast radiography with channel-cut crystals at the LNLs* <sup>1641</sup>

Hönnicke, M. G., Kellermann, G., Rocha, H. S., Giles, C., Tirao, G., Mazzaro, I., Lopes, R. T., Cusatis, C.

**Review of Scientific Instruments, 76: 093703-1-6 (2005)**

<sup>15</sup> *Structure, morphology and composition of thin Pd and Ni films deposited by dc magnetron sputtering on polycrystalline Ni and Pd foils* 1668

Pinheiro, L. M. P., Maluf, S. S., Gobbi, A. L., Paulin-Filho, P. I., Fantini, M. C. A., Nascente, P. A. P.

**Journal of Physics D - Applied Physics, 38: 4241-4 (2005)**

<sup>16</sup> *A case study of elemental and structural composition of dental calculus during several stages of maturation using SRXRF* 1669

Abraham, J., Grenón, M. S., Sánchez, H. J., Perez, C. A., Barrea, R. A.

**Journal of Biomedical Materials Research A, 75: 623-8 (2005)**

<sup>17</sup> *Stabilization of alpha-SiAlONs using a rare-earth mixed oxide (RE<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) as sintering additive* 1670

Santos, C., Strecker, K., Suzuki, P. A., Kycia, S. W., Silva, O. M. M., Silva, C. R. M.

**Materials Research Bulletin, 40: 1094-103 (2005)**

<sup>18</sup> *Production of nanostructured magnetic materials using halographic lithography* <sup>1710</sup>

Rosa, W. O., de Araújo, A. E. P., Gobbi, A. L., Knobel, M., Cescato, L.

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 294: e63-e67 (2005)**

<sup>19</sup> *The use of analytical peak profile functions to fit diffraction data of planar faulted layer crystals* 1466

Estevez-Rams, E., Penton-Madrigal, A., Martinez-Garcia, J., Fuess, H.

**Crystal Research and Technology, 40: 166-76 (2005)**

<sup>20</sup> *Organically modified transition-metal oxide mesoporous thin films and xerogels* <sup>1477</sup>

Angelomé, P. C., Soler-Illia, G. J. A. A.

**Chemistry of Materials, 17: 322-31 (2005)**

<sup>21</sup> *Hybrid non-silica mesoporous thin films* <sup>1478</sup>

Angelomé, P. C., Aldabe-Bilmes, S., Calvo, M. E., Crepaldi, E. L., Grosso, D., Sanchez, C., Soler-Illia, G. J. A. A.

**New Journal of Chemistry, 28: 1-7 (2004)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

- 22 *Morphological and magnetic properties of carbon-nickel nanocomposite thin films* 1493  
Fonseca, F. C., Ferlauto, A. S., Alvarez, F., Goya, G. F., Jardim, R. F.  
**Journal of Applied Physics, 97: 044313-1-7 (2005)**
- 23 *The role of urban air pollutants on the performance of heavy metal acumulation in Usnea amblyoclada* 1500  
Carreras, H. A., Wannaz, E. D., Perez, C. A., Pignata, M. L.  
**Environmental Research, 97: 50-7 (2004)**
- 24 *Numerical simulations of photon transport inside a beam guide* 1504  
Sánchez, H. J., Valentinuzzi, M. C.  
**X-Ray Spectrometry, 34: 164-8 (2005)**
- 25 *Surfactant-polymer aggregates formed by sodium dodecyl sulfate, poly(N-vinyl-2-pyrrolidone), and poly(ethylene glycol)* 1505  
Romani, A. P., Gehlen, M. H., Itri, R.  
**Langmuir, 21: 127-33 (2005)**
- 26 *Fabrication and characterization of a PbTe quantum dots multilayer structure* 1508  
Rodriguez, E., Jimenez, E., Jacobs, G. J., Neves, A. A. R., Cesar, C. L., Barbosa, L. C.  
**Physica E - Low Dimensional Systems & Nanostructures, 26: 361-5 (2005)**
- 27 *Study of the metals absorption in culture corn irrigated with domestic sewage by SR-TXRF* 1510  
Moreira, S., Vieira, C. B., Coraucci Filho, B., Stefanutti, R., Jesus, E. F. O. de  
**Instrumentation Science & Technology, 33: 73-85 (2005)**
- 28 *XPS and EXAFS study of supported PtSn catalysts obtained by surface organometallic chemistry on metals application to iso* 1511  
Siri, G. J., Ramallo-López, J. M., Casella, M. L., Fierro, J. L. G., Requejo, F. G., Ferretti, O. A.  
**Applied Catalysis A - General, 278:239-49 (2005)**
- 29 *Determination of L-shell intensity ratios for Yb, Hf and Ta by a parameter refinement method* 1513  
Carreras, A., Tricavelli, J., Bonetto, R., Castellano, G.  
**X-Ray Spectrometry, 34: 124-7 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>30</sup> *Electrochemical and X-ray absorption spectroscopy studies of copper coatings on a hydrogen storage alloy* 1532

Ambrósio, R. C., Ticianelli, E. A.

**Journal of Electroanalytical Chemistry, 574: 251-60 (2005)**

<sup>31</sup> *Sm and Y radiolabeled magnetic fluids: magnetic and magneto-optical characterization* 1533

Aquino, R., Gomes, J. A., Tourinho, F. A., Dubois, E., Perzynski, R., da Silva, G. J., Depeyrot, J.

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 289: 431-4 (2005)**

<sup>32</sup> *Mass fractal characteristics of silica sonogels as determined by small-angle X-ray scattering and nitrogen adsorption* 1544

Donatti, D. A., Vollet, D. R., Ibanez Ruiz, A., Silva, T. F. P.

**Physical Review B, 71: 014203-1-7 (2005)**

<sup>33</sup> *Ferromagnetic nanoclusters formed by Mn implantation in GaAs* 1548

Couto, O. D. D., Brasil, M. J. S. P., Iikawa, F., Giles, C., Adriano, C., Bortoleto, J. R. R., Pudenzi, M. A. A., Gutiérrez, H. R., Danilov, I.

**Applied Physics Letters, 86: 071906-1-3 (2005)**

<sup>34</sup> *Temperature effect on the synthesis of Au - Pt bimetallic nanoparticles* 1553

Garcia-Gutierrez, D. I., Gutierrez-Wing, C. E., Giovanetti, L., Ramallo-López, J. M., Requejo, F. G., Jose-Yacaman, M.

**Journal of Physical Chemistry B, 109: 3813-21 (2005)**

<sup>35</sup> *Carbon supported Pt-Co alloys as methanol-resistant oxygen-reduction electrocatalysts for direct methanol fuel cells* 1568

Salgado, J. R. C., Antolini, E., Gonzalez, E. R.

**Applied Catalysis B - Environmental, 57: 283-90 (2005)**

<sup>36</sup> *Rietveld structure refinement of the cation distribution in ferrite fine particles studied by X-ray powder diffraction* 1571

Gomes, J. A., Sousa, M. H., Tourinho, F. A., Mestnik-Filho, J., Itri, R., Depeyrot, J.

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 289: 184-7 (2005)**

<sup>37</sup> *Structural studies in the BaO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> system by XAS and <sup>11</sup>B-NMR* 1572

Maia, L. J. Q., Mastelaro, V. R., Schneider, J. F., Parent, P., Laffon, C.

**Journal of Solid State Chemistry, 178: 1452-63 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>38</sup> *Environment of hafnium and silicon in Hf-based dielectric films: an atomistic study by X-ray absorption spectroscopy and X-ray diffraction* 1574

Morais, J. de, Miotti, L., Bastos, K. P., Teixeira, S. R., Baumvol, I. J. R., Rotondaro, A. L. P., Chambers, J. J., Visokay, M. R., Colombo, L., Alves, M. C. M.

**Applied Physics Letters, 86: 212906-1-3 (2005)**

<sup>39</sup> *XANES study of Lanthanum-doped lead titanate ceramics* 1581

Neves, P. P., Mastelaro, V. R., Michalowicz, A., Eiras, J. A., Lopes, L. P., Doriguetto, A. C., Mascarenhas, Y. P.

**Physica Scripta, T115: 378-80 (2005)**

<sup>40</sup> *XANES study of titanium environment in BaO-B2O3-TiO2 system* 1582

Mastelaro, V. R., Feitosa, C. A. C., Maia, L. J. Q., Hernandez, A. C., Ibanez Ruiz, A., Michalowicz, A.

**Physica Scripta, T115: 486-8 (2005)**

<sup>41</sup> *Complementary methods for cluster size distribution measurements: supported platinum nanoclusters in methane reforming catalysts* 1583

Ramallo-López, J. M., Requejo, F. G., Craievich, A. F., Wei, J., Avalos-Borja, M., Iglesia, E.

**Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 228: 299-307 (2005)**

<sup>42</sup> *Microstructure and color of starch-gum films: effect of gum deacetylation and additives. Part 2* 1591

Veiga-Santos, P., Susuki, C. K., Cereda, M. P., Scamparini, A. R. P.

**Food Hydrocolloids, 19: 1064-73 (2005)**

<sup>43</sup> *Ion-irradiation-induced preferential amorphization of Ge nanocrystals in silica* 1595

Ridgway, M. C., Azevedo, G. de M., Elliman, R. G., Glover, C. J., Llewellyn, D. J., Miller, R., Wesch, W., Foran, G. J., Hansen, J., Nylandstead-Larsen, A.

**Physical Review B, 71: 094107-1-6 (2005)**

<sup>44</sup> *Development of a biosorbent for arsenite: structural modeling based on X-ray spectroscopy* 1596

Teixeira, M. C., Ciminelli, V. S. T.

**Environmental Science & Technology, 39: 895-900 (2005)**

<sup>45</sup> *Small-angle X-ray scattering on solutions of carboxymethylcellulose and bovine serum albumin* 1597

Pancera, S. M., Itri, R., Petri, D. F. S.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**Macromolecular Bioscience, 5: 331-6 (2005)**

<sup>46</sup> *Roughness and nanoholes in sol-gel thin films* <sup>1607</sup>

Antunes, A., Amaral, T. G., Brito, G. E. S., Abramof, E., Morelhão, S. L.

**Microelectronics Journal, 36: 567-9 (2005)**

<sup>47</sup> *Strain field of InAs QDs on GaAs (001) substrate surface: characterization by synchrotron X-ray Renninger scanning* 1608

Morelhão, S. L., Avanci, L. H., Freitas, R., Quivy, A. A.

**Microelectronics Journal, 36: 219-22 (2005)**

<sup>48</sup> *High contrast radiography of normal and cataractous canine lenses* <sup>1609</sup>

Antunes, A., Hönnicke, M. G., Cusatis, C., Morelhão, S. L.

**Journal of Physics D - Applied Physics, 38: A85-A88 (2005)**

<sup>49</sup> *Effect of salt nature on structure and ionic conductivity of sodium-doped siloxane-PPO ormolytes* 1612

Chaker, J. A., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Briois, V., Judeinstein, P., Craievich, A. F.

**Journal of the European Ceramic Society, 25: 2617-21 (2005)**

<sup>50</sup> *Structural study of composites of aerosil fumed silica and tetraethoxysilane-derived sonogels* 1613

Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Vollet, D. R.

**Journal of Non-Crystalline Solids, 351: 1226-31 (2005)**

<sup>51</sup> *Analysis of supported zirconocenes by X-ray emission and absorption techniques* <sup>1623</sup>

Loureiro, S. R., Silveira, F., Pires, G. P., Alves, M. C. M., Stedile, F. C., Santos, J. H. Z. dos, Bichinho, K. M., Teranishi, T.

**X-Ray Spectrometry, 34: 101-5 (2005)**

<sup>52</sup> *Determination of catalyst metal residues in polymers by X-ray fluorescence* <sup>1624</sup>

Bichinho, K. M., Pires, G. P., Stedile, F. C., Santos, J. H. Z. dos, Wolf, C. R.

**Spectrochimica Acta B - Atomic Spectroscopy, 60: 599-604 (2005)**

<sup>53</sup> *Theoretical evaluation of SiO<sub>2</sub>/Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> interface using density function theory* <sup>1625</sup>

Lino, A. C. S., Francisco, M. S. P., Takahata, Y., Gushikem, Y.

**Journal of Molecular Structure: Theochem, 724: 15-7 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>54</sup> *Accumulation of elements in annual tree rings measured by synchrotron X-ray fluorescence analysis* 1626

Vives, A. E. S., Silva, R. M. C., Tomazello Filho, M., Barroso, R. C., Zucchi, O. L. A. D., Moreira, S.

**X-Ray Spectrometry, 34: 411-6 (2005)**

<sup>55</sup> *Destruction of formic acid by soft X-rays in star-forming regions* 1628

Boechat-Roberty, H. M. , Pilling, S., Santos, A. C. F.

**Astronomy & Astrophysics, 438: 915-22 (2005)**

<sup>56</sup> *Multielement analysis of soft drinks by X-ray fluorescence spectrometry* 1629

Zucchi, O. L. A. D., Moreira, C. D., Salvador, M. J., Santos, L. L.

**Journal of Agricultural and Food Chemistry, 53: 7863-69 (2005)**

<sup>57</sup> *Structural basis for metal ion coordination and the catalytic mechanism of Sphingomyelinases D* 1631

Murakami, M. T., Fernandes Pedrosa, M. F., Tambourgi, D. V., Arni, R. K.

**Journal of Biological Chemistry, 280: 13658-64 (2005)**

<sup>58</sup> *SRTXRF analysis in different pharmaceutical forms of diclofenac sodium* 1645

Zucchi, O. L. A. D., Schiavetto, I. A., Salvador, M. J., Moreira, S.

**Instrumentation Science & Technology, 33: 215-27 (2005)**

<sup>59</sup> *Study of the metals absorption in culture corn irrigated with domestic sewage by SR-TXRF* 1646

Moreira, S., Vieira, C. B., Coraucci Filho, B., Stefanutti, R., Jesus, E. F. O. de

**Instrumentation Science & Technology, 33: 73-85 (2005)**

<sup>60</sup> *XANES/EXAFS study and catalytic properties of the confined Cr carbonyl-MCM-41 system* 1647

Requejo, F. G., Ramallo-López, J. M., Rosas-Salas, R., Dominguez, J. M., Rodriguez, J. A., Kim, J.-Y., Quijada, R

**Catalysis Today, 107-108: 750-8 (2005)**

<sup>61</sup> *XANES study of electronic and structural nature of Mn-sites in manganese oxides with catalytic properties* 1648

Figueroa, C. A., Requejo, F. G., Ledesma, E. J., Lamaita, L., Peluso, M. A., Sambeth, J. E.

**Catalysis Today, 107-108: 849-55 (2005)**



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>62</sup> *EXAFS determination of Hf localization in HDDR-Nd-Fe-B-Hf localization in HDDR-Nd-Fe-B-Hf alloys* 1649

Rodriguez Torres, C. E., Fernández van Raap, M. B., Sánchez, F. H., Pasquevich, A. F.

**Physica B - Condensed Matter, 362: 145-52 (2005)**

<sup>63</sup> *Crystalline properties and morphological changes in plastically deformed isotactic polypropylene evaluated by X-ray diffraction and transmission electron microscopy* 1650

Machado, G., Denardim, E. L. G., Kinast, E. J., Gonçalves, M. C., Luca, M. A. de, Teixeira, S. R., Samios, D.

**European Polymer Journal, 41: 129-38 (2005)**

<sup>64</sup> *Diffraction enhanced X-ray imaging of mammals crystalline lens* 1654

Antunes, A., Hönnicke, M. G., Safatle, A. M. V., Cusatis, C., Barros, P. S. de M., Morelhão, S. L.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 238: 28-31 (2005)**

<sup>65</sup> *Structural insights for fatty acid binding in a Lys49-phospholipase A2: crystal structure of myotoxin II from Bothrops moojeni complexed with stearic acid* 1655

Watanabe, L., Soares, A. M., Ward, R. J., Fontes, M. R. de M., Arni, R. K.

**Biochimie, 87: 161-7 (2005)**

<sup>66</sup> *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of myotoxin I, a Lys49-phospholipase A2 from Bothrops moojeni* 1656

Marchi-Salvador, D. P., Silveira, L. B., Soares, A. M., Fontes, M. R. de M.

**Acta Crystallographica F, 61: 882-4 (2005)**

<sup>67</sup> *Crystallization and preliminary X-ray diffraction studies of two myotoxic Lys49-phospholipases A2 complexed with alpha-tocopherol* 1657

dos Santos, J. I., Takeda, A. A. S., Marchi-Salvador, D. P., Soares, A. M., Fontes, M. R. de M.

**Protein and Peptide Letters, 12(8): 819-22 (2005)**

<sup>68</sup> *Geometric, electronic, and magnetic structure of Co<sub>2</sub>FeSi: curie temperature and magnetic moment measurements and calculations* 1659

Wurmehl, S., Fecher, G. H., Kandpal, H. C., Ksenonotov, V., Felser, C., Lin, H. J., Morais, J. de

**Physical Review B, 72: 184434-1-9 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>69</sup> *Synchrotron X-ray diffraction study of the tetragonal-cubic phase boundary of nanocrystalline ZrO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> synthesized by a gel-combustion process* 1660

Lamas, D. G., Fuentes, R. O., Fábregas, I. O., Fernández de Rapp, M. E., Lascalea, G. E., Casanova, J. R., Walsøe de Reça, N. E., Craievich, A. F.

**Journal of Applied Crystallography, 38: 867-73 (2005)**

<sup>70</sup> *Mechanism of lateral ordering of InP dots grown on InGaP layers* 1661

Bortoleto, J. R. R., Gutiérrez, H. R., Cotta, M. A., Bettini, J.

**Applied Physics Letters, 87: 013105-13 (2005)**

<sup>71</sup> *Carbon supported Pt<sub>75</sub>M<sub>25</sub> (M = Co, Ni) alloys as anode and cathode electrocatalysts for direct methanol fuel cells* 1662

Antolini, E., Salgado, J. R. C., Gonzalez, E. R.

**Journal of Electroanalytical Chemistry, 580: 145-154 (2005)**

<sup>72</sup> *Effects of geometric and electronic factors on ORR activity of carbon supported Pt-Co electrocatalysts in PEM fuel cells* 1663

Antolini, E., Salgado, J. R. C., Giz, M. J., Gonzalez, E. R.

**International Journal of Hydrogen Energy, 30: 1213-20 (2005)**

<sup>73</sup> *Pt-Sn/C electrocatalysts for methanol oxidation synthesized by reduction with formic acid* 1664

Antolini, E., Gonzalez, E. R.

**Eletochimica Acta, 50: 5496-5503 (2005)**

<sup>74</sup> *Characterization of zirconized silica supports for HPLC* 1665

Faria, A. M., Magalhães, D. R., Collins, K. E., Collins, C. H.

**Analytica Chimica Acta, 550: 137-143 (2005)**

<sup>75</sup> *Photo-induced effects in Ge<sub>25</sub>Ga<sub>10</sub>S<sub>65</sub> glasses studied by XPS and XAS* 1666

Lisboa-Filho, P. N., Mastelaro, V. R., Schreiner, W. H., Messaddeq, S. H., Siu Li, M., Messaddeq, Y., Hammer, P., Ribeiro, S. J. L., Parent, P., Laffon, C.

**Solid State Ionics, 176: 1403-9 (2005)**

<sup>76</sup> *Functional nanostructured chitosan-siloxane hybrids* 1672

Silva, S. S., Ferreira, R. A. S., Fu, L., Carlos, L. D., Mano, J. F., Reis, R. L., Rocha, J.

**Journal of Materials Chemistry, 15: 3952-61 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>77</sup> *Production of soybean phosphatidylcholine-chitosan nanovesicles by reverse phase evaporation: a step by step study* 1675

Mertins, O., Sebben, A., Pohlmann, A. R., Silveira, N. P. da

**Chemistry and Physics of Lipids, 138: 29-37 (2005)**

<sup>78</sup> *Hybrid particles of polystyrene and carboxymethyl cellulose as substrates for copper ions* 1677

Soares, K. V., Masini, J. C., Torresi, R. M., Carmona-Ribeiro, A. M., Petri, D. F. S.

**Langmuir, 21: 8515-9 (2005)**

<sup>79</sup> *Structural and magnetic study of LaBaCoCuO5+sigma* 1679

Suescun, L., Jones, C. Y., Cardoso, C. A., Lynn, J. W., Toby, B. H., Araújo-Moreira, F. M., Lima, O. F. de, Pardo, H., Mombrú, A. W.

**Physical Review B, 71: 144405-1-9 (2005)**

<sup>80</sup> *Ionic fragmentation on CIC(O)SCI. Evidence of a highly charged molecular ion and confirmation of unusual dissociation mechanisms for halocarbonylsulfenyl chlorides* 1680

Erben, M. F., Romano, R. M., Della Védova, C. O.

**Journal of Physical Chemistry A, 109: 304-13 (2005)**

<sup>81</sup> *Small-angle X-ray scattering and nitrogen adsorption study of the nanoporosity elimination in TEOS sonohydrolysis-derived xerogels* 1682

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

**Physica Status Solidi A, 202: 411-8 (2005)**

<sup>82</sup> *Structural characteristics of gels prepared from sonohydrolysis and conventional hydrolysis of TEOS: an emphasis on the mass fractal as determined from the pore size distribution* 1683

Vollet, D. R., Torres, R. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A.

**Physica Status Solidi A, 202: 2700-8 (2005)**

<sup>83</sup> *The performance of carbon-supported PtOs electrocatalysts for the hydrogen oxidation in the presence of CO* 1685

Santiago, E. I., Ticianelli, E. A.

**International Journal of Hydrogen Energy, 30: 159-65 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>84</sup> *Electrocatalise das reações de oxidação de hidrogênio e de redução de oxigênio* <sup>1686</sup>

Ticianelli, E. A., Camara, G. A., Santos, L. G. R. A.

**Química Nova, 28: 664-9 (2005)**

<sup>85</sup> *Electrochemical performance of dispersed Pt-M(M=V, Cr and Co) nanoparticles for the oxygen reduction electrocatalysis* <sup>1687</sup>

Lima, F. H. B., Giz, M. J., Ticianelli, E. A.

**Journal of Brazilian Chemical Society, 16: 328-36 (2005)**

<sup>86</sup> *Physical characterization and electrochemical activity of bimetallic platinum-silver particles for oxygen reduction in alkaline electrolyte* <sup>1688</sup>

Lima, F. H. B., Sanches, C. D., Ticianelli, E. A.

**Journal of the Electrochemical Society, 152: A1466-A1473 (2005)**

<sup>87</sup> *Crystallization and preliminary X-ray diffraction studies of two myotoxic Lys49-phospholipases A2 complexed with alpha-tocopherol* <sup>1690</sup>

dos Santos, J. I., Takeda, A. A. S., Marchi-Salvador, D. P., Soares, A. M., Fontes, M. R. de M.

**Protein and Peptide Letters, 12: 819-22 (2005)**

<sup>88</sup> *Preparation and characterization of Ce/Zr mixed oxides and their use as catalysts for the direct oxidation of dry CH<sub>4</sub>* <sup>1692</sup>

Larrondo, S, Vidal, M. A., Irigoyen, B., Craievich, A. F., Lamas, D. G., Fábregas, I. O., Lascalea, G. E., Walsõe de Reça, N. E., Amadeo, N.

**Catalysis Today, 107-108: 53-9 (2005)**

<sup>89</sup> *Analyses of regenerative bone matrix of rat tibia after laser photo-excitation by SEM and AFM* <sup>1694</sup>

Baranauskas, V., Garavello, I., Guo, Z. J., Cruz-Höfling, M. A. da

**Applied Surface Science, 248: 492-8 (2005)**

<sup>90</sup> *Field-emission properties of macroporous silicon grown at high anodization voltages* <sup>1695</sup>

Baranauskas, V., Fontana, M., Guo, Z. J., Ceragioli, H. J., Peterlevitz, A. C.

**Journal of Applied Physics, 97: 014912-1-4 (2005)**

<sup>91</sup> *Field-emission properties of nanocrystalline tin oxide films* <sup>1696</sup>

Baranauskas, V., Fontana, M., Guo, Z. J., Ceragioli, H. J., Peterlevitz, A. C.

**Sensors and Actuators B - Chemical, 107: 474-8 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>92</sup> *Experimental characterization of beam guides for TXRF* <sup>1697</sup>

Sánchez, H. J., Valentinuzzi, M. C.

**Radiation Physics and Chemistry, 73: 243-7 (2005)**

<sup>93</sup> *Experimental determination of L subshell fluorescence yields of Ba, La and Pr using synchrotron radiation* <sup>1698</sup>

Badiger, N. M., Bonzi, E.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, B 243: 34-37 (2005)**

<sup>94</sup> *Experimental L X-ray fluorescence cross-sections for elements with  $45 < Z < 50$  at 7 KeV by synchrotron radiation photoionization* <sup>1699</sup>

Bonzi, E., Barrea, R. A.

**X-Ray Spectrometry, 34: 253-7 (2005)**

<sup>95</sup> *Coherent scattering X-ray imaging at the Brazilian National Synchrotron Laboratory: preliminary breast images* <sup>1700</sup>

Castro, C. R. F., Barroso, R. C., Oliveira, L. F. de, Lopes, R. T.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, A 548: 116-22 (2005)**

<sup>96</sup> *Scattering signatures for some human tissues using synchrotron radiation* <sup>1701</sup>

Castro, C. R. F., Barroso, R. C., Lopes, R. T.

**X-Ray Spectrometry, 34: 477-80 (2005)**

<sup>97</sup> *Nanostructure and crystallisation kinetics of poly(ethylene oxide)/poly(4-vinylphenol-co-2-hydroxyethyl methacrylate) blends* <sup>1702</sup>

Pereira, R. P., Rocco, A. M.

**Polymer, 46:12493-502 (2005)**

<sup>98</sup> *Ordered mesoporous hybrid thin films with double organic functionality and mixed oxide framework* <sup>1703</sup>

Angelomé, P. C., Soler-Illia, G. J. A. A.

**Journal of Materials Chemistry, 15: 3903-12 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>99</sup> *Spectroscopic characterization of polyaniline formed by using copper(II) in homogeneous and MCM-41 molecular sieve media* 1704

Izumi, C. M. S., Constantino, V. R. L., Temperini, M. L. A.

**Journal of Physical Chemistry B, 109: 22131-140 (2005)**

<sup>100</sup> *Local structure and near-infrared emission features of neodymium-based amine functionalized organic/inorganic hybrids* 1705

Gonçalves, M. C., Silva, N. J. O., Zea Bermudez, V. de, Sá Ferreira, R. A., Carlos, L. D., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Ostrovskii, D., Correia Vilela, I. C., Craievich, A. F.

**Journal of Physical Chemistry B, 109: 20093-104 (2005)**

<sup>101</sup> *(Nb<sub>2</sub>W<sub>4</sub>O<sub>19</sub>), TMA<sub>2</sub>, Na<sub>4</sub>(OH<sub>2</sub>)<sub>14</sub>(SO<sub>4</sub>): a new layered structure with lindqvist heteropolyanions, XAS characterization of the HPAs* 1706

França, M. C. K., Eon, J. G., Fournier, M.

**Solid State Sciences, 7: 1533-41 (2005)**

<sup>102</sup> *Structural study of CoxGe<sub>100-x</sub> alloys produced by mechanical alloying* 1709

Machado, K. D., Gasperini, A. A. M., Souza, S. M. de, Maurmann, C. E., Lima, J. C., Grandi, T. A.

**Solid State Communications, 136: 466-9 (2005)**

<sup>103</sup> *The use of Langmuir-Blodgett films of a perylene derivative and polypyrrole in the detection of trace levels of Cu<sup>2+</sup> ions* 1711

Antunes, P. A., Santana, C. M., Aroca, R. F., Oliveira Jr., O. N., Constantino, C. J. L., Riul Jr., A.

**Synthetic Metals, 148: 21-4 (2005)**

<sup>104</sup> *Structure and mechanism of the alkyl hydroperoxidase AhpC, a key element of the mycobacterium tuberculosis defense system against oxidative stress* 1719

Guimarães, B. G., Souchon, H., Honoré, N., Saint-Joanis, B., Brosch, R., Shepard, W., Cole, S. T., Alzari, P. M.

**Journal of Biological Chemistry, 280: 25735-42 (2005)**

<sup>105</sup> *Nanocrystalline anatase thin films prepared from redispersible sol-gel powders* 1722

Kaminski, R. C., Pulcinelli, S. H., Craievich, A. F., Santilli, C. V.

**Journal of the European Ceramic Society, 25: 2175-80 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>106</sup> *Structural model of gelation processes of a sodium silicate sol destabilized by calcium ions: combination of SAXS and rheological measurements* <sup>1723</sup>

Gaboriaud, F., Nonat, A., Chaumont, D., Craievich, A.

**Journal of Non-Crystalline Solids, 351: 351-4 (2005)**

<sup>107</sup> *Structure in amorphous semiconductors: extrinsic and intrinsic* <sup>1724</sup>

Ridgway, M. C., Glover, C. J., Azevedo, G. de M., Kluth, S. M., Yu, K. M., Foran, G. J.

**Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 238: 294-301 (2005)**

<sup>108</sup> *Porphyrin inclusion into hexaniobate nanoscrolls* <sup>1748</sup>

Bizeto, M. A., Constantino, V. R. L.

**Microporous and Mesoporous Materials, 83: 212-8 (2005)**

<sup>109</sup> *Eletrocatalise das reações de oxidação de hidrogênio e de redução de oxigênio* <sup>1749</sup>

Ticianelli, E. A., Camara, G. A., Santos, L. G. R. A.

**Química Nova, 28: 664-9 (2005)**

<sup>110</sup> *Phorphyrin effects on Zwitterionic HPS micelles as investigated by small-angle X-ray scattering (SAXS) and electron paramagnetic resonance (EPR)* <sup>1750</sup>

Gandini, S. C. M., Itri, R., Sousa Neto, D., Tabak, M.

**Journal of Physical Chemistry B, 109: 22264-72 (2005)**

<sup>111</sup> *Lattice distortion effects on the magnetostructural phase transition of MnAs* <sup>1751</sup>

Iikawa, F., Brasil, M. J. S. P., Adriano, C., Couto, O. D. D., Giles, C., Santos, P. V., Daweritz, L., Rungger, I., Sanvito, S.

**Physical Review Letters, 95: 077203-1-4 (2005)**

<sup>112</sup> *The effect of cyclic voltammetry on the crystalline order of PdPc thin films* <sup>1752</sup>

Gaffo, L., Brasil, M. J. S. P., Cerdeira, F., Giles, C., Moreira, W. C.

**Journal of Porphyrins and Phthalocyanines, 9: 89-93 (2005)**

<sup>113</sup> *X-ray diffraction imaging self-detected with a CCD* <sup>1753</sup>

Hönnicke, M. G., Cusatis, C.

**Journal of Physics D - Applied Physics, 38: A73-7 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

- 114 *Temperature studies of KH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>: Mn crystals using x-ray diffraction and polarized Raman scattering* 1754

Remédios, C. M. R., Paraguassu, W., Freire, P. T. C., Mendes-Filho, J., Sasaki, J. M., Melo, F. E. A.

**Physical Review B, 72: 014121-1-4 (2005)**

- 115 *Native crystal structure of a nitric oxide-releasing lectin from the seeds of *Canavalia maritima** 1760

Gadelha, C. A. de A., Moreno, F. B. M. B., Santi-Gadelha, T., Cajazeiras, J. B., Rocha, B. A. M., Assreuy, A. M. S., Mota, M. R. L., Pinto, N. V., Meireles, A. V. P., Borges, J. C., Freitas, B. T., Canduri, F., Souza, E. P., Delatorre, P., Criddle, D. N., Azevedo Jr., W. F. de, Cavada, B. S.

**Journal of Structural Biology, 152: 185-94 (2005)**

- 116 *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of a lectin from *Canavalia maritima* seeds* 1761

Gadelha, C. A. de A., Moreno, F. B. M. B., Santi-Gadelha, T., Cajazeiras, J. B., Rocha, B. A. M., Rustiguel, J. K. R., Freitas, B. T., Canduri, F., Delatorre, P., Azevedo Jr., W. F. de, Cavada, B. S.

**Acta Crystallographica F, 61: 87-9 (2005)**

- 117 *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of a new chitin-binding protein from *Parkia platycephala* seeds* 1762

Cavada, B. S., Castellón, R. E. R., Vasconcelos, G. G., Rocha, B. A. M., Bezerra, G. A., Debray, H., Delatorre, P., Nagano, C. S., Toyama, M., Pinto, V. P. T., Moreno, F. B. M. B., Canduri, F., Azevedo Jr., W. F. de

**Acta Crystallographica F, 61: 841-3 (2005)**

- 118 *Porphyrin effects on zwitterionic HPS micelles as investigated by small-angle X-ray scattering (SAXS) and electron paramagnetic resonance (EPR)* 1763

Gandini, S. C. M., Itri, R., Sousa Neto, D., Tabak, M.

**Journal of Physical Chemistry B, 109: 22264-72 (2005)**

- 119 *Correlation between heavy metal ions (copper, zinc, lead) concentrations and root length of *Allium cepa* L. in polluted river water* 1768

Palácio, S. M., Espinoza-Quiñones, F. R., Galante, R. M., Zenatti, D. C., Seolatto, A. A., Lorenz, E. K., Zacarkim, C. E., Rossi, N., Rizzuto, M. A., Tabacniks, M. H.

**Brazilian Archives of Biology and Technology, 48: 191-6 (2005)**

- 120 *Effects of dipolar interactions on magnetic properties of granular solids* 1769

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

**Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 294: 127-132 (2005)**



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

<sup>121</sup> *Removal of heavy metal from polluted river water using aquatic macrophytes Salvinia sp* 1770

Espinoza-Quiñones, F. R., Zacarkim, C. E., Palácio, S. M., Obregón, C. L., Zenatti, D. C., Galante, R. M., Rossi, N., Rossi, F. L., Pereira, I. R. A.

**Brazilian Journal of Physics, 35: 744-6 (2005)**

<sup>122</sup> *Role of magnetic interparticle coupling on the field dependence of the superparamagnetic relaxation time* 1771

Nunes, W. C., Socolovsky, L.M., Denardim, E. L. G., Cebollada, F., Brandl, A. L., Knobel, M.

**Physical Review B, 72: 212413-1-4 (2005)**

<sup>123</sup> *Trace element concentration in São Francisco river water using STXRF and PIXE techniques* 1772

Espinoza-Quiñones, F. R., Palácio, S. M., Galante, R. M., Rossi, F. L., Zenatti, D. C., Pereira, I. R. A., Welter, R. A., Rossi, N., Obregón, C. L.

**Brazilian Journal of Physics, 35: 757-60 (2005)**

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS**  
**Relatório Anual de 2005**

**E.2 Parecer dos Auditores Independentes**