

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Índice Geral

A. SUMÁRIO EXECUTIVO.....	4
B. RELATÓRIO POR PROGRAMA.....	5
P1 - P,D&I com Luz Síncrotron	5
1.1 – Fonte de Luz Síncrotron.....	5
1.2 Linhas de Luz.....	10
1.3 Uso das Linhas de Luz.....	18
P2 - P,D&I em Micro- e Nano-tecnologias.....	21
2.1 Infra-estrutura.....	21
2.2 Objetivos do Programa.....	22
2.3 Atividades.....	22
P3 - P,D&I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia.....	27
3.1 - Laboratório de Biologia Molecular (laboratório de pesquisa e apoio).....	27
3.2 - Laboratório de Cristalografia de Proteínas (LCP).....	28
3.3 - Laboratório de Espectroscopia e Calorimetria (LEC).....	30
3.4 - Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear (RMN).....	30
3.5 - Laboratório de Espectrometria de Massas (MAS).....	32
3.6 - Projetos Institucionais e Resultados	34
P4 - P,D&I em Aceleradores e Instrumentação.....	36
4.1 Melhoramentos na estabilidade do feixe.....	36
4.2 - Melhoramentos no Sistema de Injeção.....	37
4.3 - Atualização do Sistema de Proteção Radiológica do Anel de Armazenamento e Linhas de Luz	38
4.4 - Dispositivos de Inserção.....	39
P5 - Interação com o Setor Industrial	42
P6 - Informação, Educação e Divulgação	44
6.1 – Informação administrativa e científica	44
6.2 – Educação e produção científica	44
P7 - Gestão e Planejamento	48
INDICADORES DE DESEMPENHO - 2006	52
C. CONCLUSÃO	62
APÊNDICES.....	64

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

Índice de Tabelas

Tabela 1: Parâmetros de desempenho da fonte de luz síncrotron em 2006.	6
Tabela 2: Uso da fonte de luz síncrotron em 2006.	7
Tabela 3: Propostas realizadas nas Linhas de Luz.	20
Tabela 4: Resumo dos resultados da SMOIBNet e pessoal envolvido.	34
Tabela 5: Número por ano e média em três anos das proteínas liberadas no <i>Protein Data Bank</i> que utilizaram o LNLS para a coleta de dados.	35
Tabela 6: Recursos financeiros com envolvimento de contratos industriais.	43
Tabela 7: Eventos e treinamentos realizados no LNLS em 2006.	45
Tabela 8: Comparação da evolução das publicações em periódicos indexados LNLS x Brasil x Mundo.	47
Tabela 9: Orçamento do Plano Diretor 2006-2009.	48
Tabela 10: Orçamento do 13º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, período 2006-2009.	48
Tabela 11: Comparação do Orçamento de 2006.	49
Tabela 12: Receitas e Despesas – Ano 2006.	50
Tabela 13: Horas-linha fornecidas no ano de 2006.	53
Tabela 14: Pesquisadores da ABTLuS.	64
Tabela 15: Pós-doutores supervisionados por pesquisadores da ABTLuS.	64
Tabela 16: Estudantes de doutorado orientados por pesquisadores da ABTLuS.	65
Tabela 17: Estudantes de mestrado orientados por pesquisadores da ABTLuS.	65

Índice de Figuras

Figura 1: Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em operação para usuários em 2006.	7
Figura 2: Tempo de vida médio do feixe em operação para usuários em 2006.	8
Figura 3: Tempo de feixe fornecido para usuários nos 10 anos de operação da Fonte de Luz Síncrotron. A queda observada em 2001 corresponde ao período do racionamento de energia elétrica (“apagão”).....	8
Figura 4: Evolução da confiabilidade da Fonte de Luz Síncrotron ao longo de 10 anos de operação.	9
Figura 5: Evolução da carga total entregue aos usuários ao longo de 10 anos de operação.	9
Figura 6: Fluxo em função da energia da linha W01A:MX2.	13
Figura 7: Primeiros resultados obtidos na linha de luz W01A:MX2 utilizando técnica MAD. Superior: padrão de difração e espectro de fluorescência do cristal com selênio-metionina medido na borda K do Se. Inferior: Estatística dos dados coletados.	14
Figura 8: Esquerda: linha de luz W011A:MX2; Direita: Detector de raios-X Marmosaic 225.	14
Figura 9: Medidas do decaimento da intensidade de fluorescência da proteína Hsp17 (10 µM) a 25 °C. As linhas sólidas correspondem ao ajuste dos dados a uma exponencial dupla, resultando em tempos de vida de 4,7 ns e 1,7 ns ($\chi^2=1,55$).	15
Figura 10: Comparação entre o fluxo das linhas D04B:XAFS1 e D08B:XAFS2 em função da energia. A primeira tem um tamanho de feixe variável entre 0,5 e 0,9 mm ² enquanto a segunda tem um tamanho fixo de 1 mm ²	15
Figura 11: Linha de luz XAFS2.	16
Figura 12: Projeto (superior) e esquema (inferior) da linha de luz U11A:PGM.	17
Figura 13: Número de propostas realizadas nas linhas de luz em função do ano.	18
Figura 14: Evolução geográfica do uso das linhas de luz.	18
Figura 15: Seção do novo prédio, mostrando as salas para a microscopia eletrônica.	21
Figura 16: Novos microscópios adquiridos através de financiamento FAPESP.	23
Figura 17: Número de propostas realizadas no LME por ano.	24
Figura 18: Propostas realizadas para cada microscópio eletrônico no ano de 2006.	24
Figura 19: “Micro-array” sistema de análise de DNA.	28
Figura 20: “Honeybee” (painel superior) com destaque ao dispositivo distribuidor (direita superior) e os robôs de “MatrixMaker” (painel inferior) para a cristalização automatizada de proteínas.	29

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Figura 21: Projetos desenvolvidos com uso dos robôs de automação para cristalização de proteínas em 2006.	29
Figura 22: Gerador de raios-X Rigaku.....	30
Figura 23: Infra-estrutura do “Cryo-Probe”.....	31
Figura 24: Ocupação dos espectrômetros de Ressonância Magnética Nuclear em 2006.....	32
Figura 25: Espectrômetro de massa MALDI MS/MS adquirido para substituir o equipamento defeituoso.....	33
Figura 26: Propostas submetidas e executadas nos espectrômetros de massa.....	33
Figura 27: Corrente e energia do feixe durante o novo procedimento de injeção.....	38
Figura 28: Vista da Fonte de Luz Síncrotron após instalação da nova cobertura de concreto.....	39
Figura 29: O ondulador elíptico (EPU) durante testes na bancada de medidas magnéticas.....	40
Figura 30: Instalação da câmara de vácuo do ondulador.....	41
Figura 31: Evolução das publicações em periódicos indexados.....	45
Figura 32: Evolução das publicações com Fator de Impacto superior a 5.....	46
Figura 33: Distribuição das publicações por fator de impacto.....	46
Figura 34: Evolução do Orçamento do Contrato de Gestão, 1999-2006.....	50
Figura 35: Perfil da Força de Trabalho.....	51
Figura 36: Evolução das propostas de pesquisas realizadas.....	57
Figura 37: Resultado da Pesquisa de Satisfação dos Usuários.....	58

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

A. SUMÁRIO EXECUTIVO

As principais atividades realizadas e resultados obtidos em 2006 foram:

- O fornecimento de 3.913 horas de feixe para realização de experimentos nas linhas de luz, correspondendo a 99,3% do tempo pactuado;
- A confiabilidade da fonte de luz síncrotron que atingiu 95%, valor pactuado ;
- A disponibilização de doze linhas de luz para os usuários, fornecendo 44.093 horas de linhas de luz, correspondendo a 83% do tempo pactuado;
- A abertura da linha D02A:SAXS2 (Espalhamento de raios X a baixos ângulos II) para os usuários;
- A aquisição dos dois novos microscópios eletrônicos de transmissão;
- A instalação de um sistema de *micro-array* para análise funcional dos genes;
- A instalação de dois robôs de cristalização para melhorar a eficiência no processo de cristalização de proteínas;
- A aquisição de um sistema de *cryo-probe* para o espectrômetro de ressonância magnética nuclear de 600 MHz;
- A instalação da câmara de vácuo do ondulator e início de sua instalação na fonte de luz síncrotron;
- A conclusão do novo sistema de proteção radiológica no Hall Experimental, permitindo a permanência dos usuários durante os períodos de injeção de elétrons já no início de 2007;
- Finalização da construção e caracterização do ondulator;
- Conclusão da especificação técnica do *wiggler* supercondutor para ciência dos materiais, com foco na nanociência e nanotecnologia;
- A realização de 683 propostas de pesquisa utilizando todas as instalações abertas do LNLS, representando 95% do valor pactuado;
- A realização de 8 projetos de desenvolvimento industrial;
- A publicação de 227 artigos científicos indexados sendo 13 com fator de impacto maior que 5, superando os valores pactuados.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

B. RELATÓRIO POR PROGRAMA

O Relatório Anual apresenta os resultados técnico-científicos e de gestão da Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron, Organização Social que opera o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), mediante o Contrato de Gestão (CG) firmado com o Ministério de Ciência e Tecnologia (MCT) e o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

P1 - P,D&I com Luz Síncrotron

1.1 – Fonte de Luz Síncrotron

A Fonte de Luz Síncrotron forneceu feixe para usuários de janeiro a meados de outubro de 2006 em regime de operação contínuo (24 horas por dia) de segunda a sexta-feira, com dois dias por mês reservados para manutenção e melhorias dos subsistemas. Ao todo foram fornecidas 3.913 horas de feixe para usuários, sendo 3.797 horas em horários programados e o restante em horário extraordinário. A confiabilidade da fonte, definida como a razão do número de horas fornecidas em horário programado para o número de horas programadas alcançou 95%. Esta confiabilidade manteve-se estável ao longo de todo o ano, com uma ligeira redução em agosto (Figura 1), enquanto o tempo de vida do feixe (Figura 2) mostra a tendência esperada de crescimento à medida que progride o condicionamento das câmaras de vácuo do anel de armazenamento. Os parâmetros de desempenho da Fonte de Luz Síncrotron estão mostrados na Tabela 1, enquanto os parâmetros de uso estão mostrados na Tabela 2.

A partir de meados de outubro, a operação para usuários foi interrompida de forma a permitir a instalação da câmara de vácuo do dispositivo de inserção ondulator elíptico (EPU) recentemente construído nas oficinas do LNLS, juntamente com a instalação de uma câmara de vácuo do dipolo modificada (com uma saída a zero graus, i.e. alinhada com o trecho reto precedente, necessária para se realizar a extração da luz produzida pelo ondulator), além da implementação de uma série de modificações nos *front-ends* e cabanas das linhas de luz síncrotron, uma parte importante do programa de atualização do sistema de proteção radiológica e blindagem da fonte de luz síncrotron.

A fonte operou em modo de multi-pacote (*multi-bunch*) durante todo o ano, exceto por duas semanas em outubro, quando foi fornecido o modo de pacote único (*single-bunch*), em que apenas um dos 148 possíveis pacotes de elétrons é efetivamente preenchido. Esse modo é de interesse para algumas linhas de luz (em função da relativamente baixa intensidade do feixe de luz nessas condições) e neste ano foi utilizado por três delas (SGM, TGM e SXS).

A modulação em fase do sinal de radiofrequência (RF) foi utilizada durante todo o ano como um procedimento operacional rotineiro que nos permitiu evitar instabilidades longitudinais excitadas por modos de ordem superior das cavidades de RF. Além disso, a modulação em fase se mostrou uma ferramenta conveniente para esticar os pacotes,

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

reduzindo a densidade eletrônica em seu interior e os correspondentes efeitos de espalhamento elétron-elétron, alongando assim o tempo de vida do feixe, particularmente na operação em modo de pacote único.

A evolução do tempo total de feixe entregue aos usuários da Fonte de Luz Síncrotron nestes dez anos de funcionamento (Figura 3) indica que estamos aproximadamente estacionados neste parâmetro desde 2003, exceto por uma pequena redução ocorrida em 2004, em função de problemas técnicos com o sistema de RF do anel de armazenamento. O incremento deste parâmetro depende de um correspondente incremento orçamentário que permita a operação da fonte de luz síncrotron para usuários durante o fim de semana. A confiabilidade da fonte de luz síncrotron tem se mantido estável (Figura 4). A quantidade total de luz entregue aos usuários mostra tendência de crescimento contínuo ao longo dos anos (Figura 5) em função das melhorias contínuas em nossos equipamentos que nos permitiram armazenar correntes mais altas e obter maior tempo de vida do feixe a partir da entrada em operação do síncrotron injetor (2001-2002) e da implementação das ampliações dos sistemas de vácuo (2002) e radio-freqüência (2003-2004) do anel de armazenamento.

Parâmetros de Desempenho Operacional da Fonte de Luz Síncrotron. em 2006														
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out (SB)	Nov	Dez	Media Tot	
Corrente Inicial Média	240	243	249	250	251	251	250	249	251	7	-	-	249	mA
Corrente Média	181	183	190	197	215	190	189	192	179	5	-	-	191	mA
Tempo de Vida Médio	17.9	16.9	17.9	18.5	18.9	18.5	18.8	19.4	19.4	14	-	-	19	h
Corrente Integrada	61.6	57.9	85.3	78.0	98.8	85.1	76.9	82.4	79.2	1	-	-	706	A.h
Tempo de Feixe Programado	353	322	466	412	466	450	412	466	435	225	-	-	4005	h
Tempo de Feixe durante o horário programado	331	301	444	391	455	440	400	422	411	202	-	-	3797	h
Tempo Total de Feixe	340	317	449	396	460	448	406	430	442	226	-	-	3913	h
Confiabilidade	94	93	95	95	98	98	97	91	95	90	-	-	95	%
Desempenho	113.8	113.5	117.9	121.2	127.9	118.9	118.9	120.2	116.2	-	-	-	119.0	%

Tabela 1: Parâmetros de desempenho da fonte de luz síncrotron em 2006.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Uso da Fonte de Luz Síncrotron em 2006														
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out (SB)	Nov	Dez	Total	
Tempo de Feixe destinado aos Usuários	340	317	449	396	460	448	406	430	442	226	-	-	3913	h
Injeção	21	14	37	40	31	25	25	33	38	27	-	-	291	h
Estudos de Máquina	38	40	79	40	170	58	141	117	88	11	32	72	886	h
Manutenção	25	73	23	18	10	13	26	13	11	122	179	106	617	h
Comissionamento	271	136	144	223	67	168	137	23	15	157	498	327	2166	h
Máquina Desligada	32	67	0	0	0	0	0	93	118	189	11	239	751	h
Falha	18	24	11	4	6	7	8	36	9	12	-	-	136	h
Total	744	672	744	720	744	720	744	744	720	744	720	744	8760	h
Grau de Saturação	96	90	100	100	100	100	100	88	84	75	98	68	91	%
Número de Dias	31	28	31	30	31	30	31	31	30	31	30	31	365	d

Tabela 2: Uso da fonte de luz síncrotron em 2006.

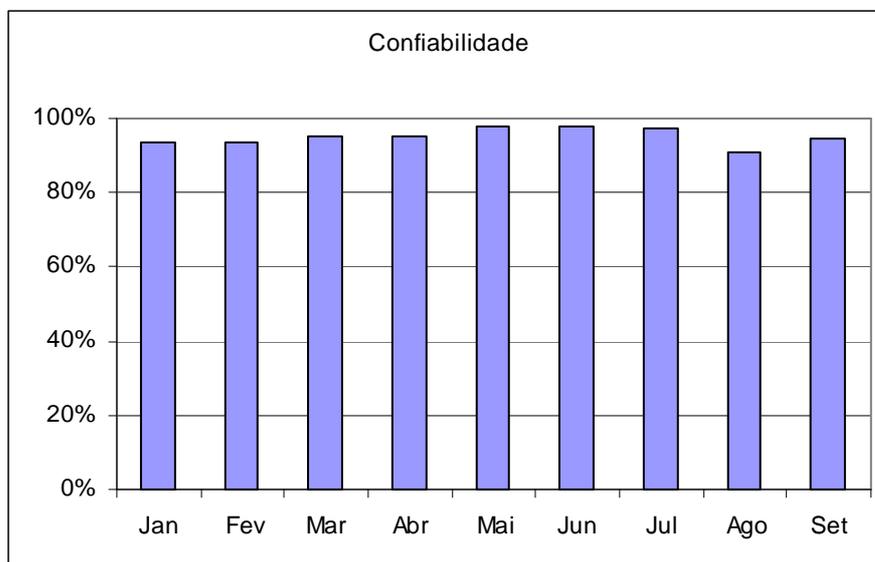


Figura 1: Confiabilidade da fonte de luz síncrotron em operação para usuários em 2006.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

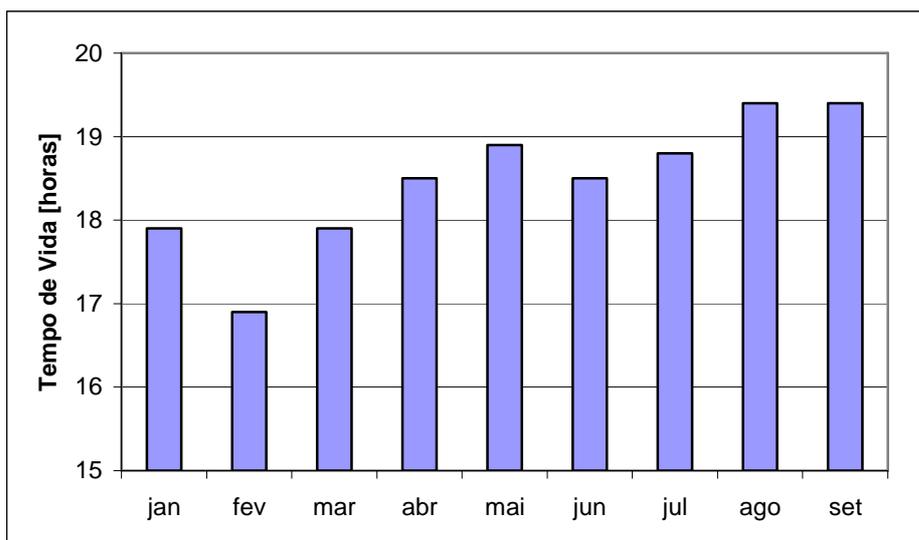


Figura 2: Tempo de vida médio do feixe em operação para usuários em 2006.

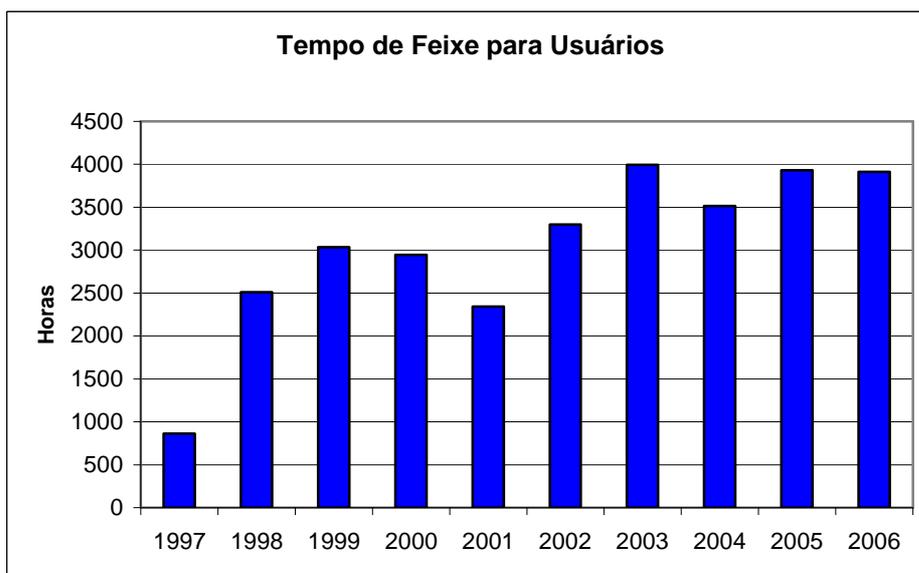


Figura 3: Tempo de feixe fornecido para usuários nos 10 anos de operação da Fonte de Luz Síncrotron. A queda observada em 2001 corresponde ao período do racionamento de energia elétrica (“apagão”).

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

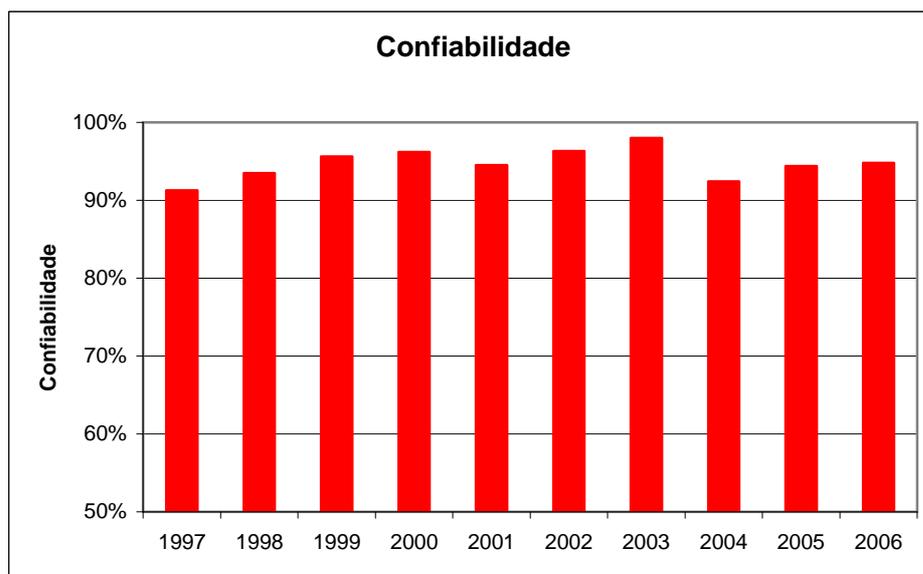


Figura 4: Evolução da confiabilidade da Fonte de Luz Síncrotron ao longo de 10 anos de operação.

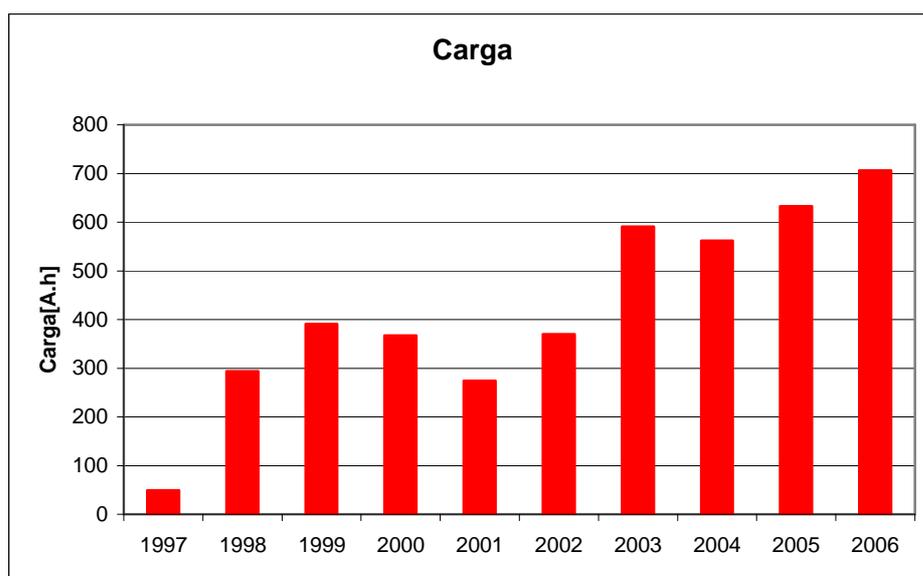


Figura 5: Evolução da carga total entregue aos usuários ao longo de 10 anos de operação.

No final de 2006 foi criado um Comitê Interno das Linhas de Luz para assessorar a Direção na formulação de diretrizes para a implementação de novas linhas de luz, formado pelos pesquisadores coordenadores dos quatro grupos que concentram as linhas de luz. Esse Comitê Assessor será responsável por avaliar as propostas de construção de novas linhas de luz e/ou reformas e melhorias de grande porte nessas, utilizando o apoio de pesquisadores externos quando julgar necessário.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

1.2 Linhas de Luz

A seguir são detalhadas as principais melhorias e adaptações nas linhas de luz.

1) D03B:MX1 – espectroscopia de macromoléculas I

Melhorias: o sistema de resfriamento de amostras e o estereomicroscópio para manipulação do cristal foram substituídos.

Perspectivas: O monocromador necessita de muito tempo para estabilizar sua temperatura, provocando perda efetiva de tempo de feixe. É necessária a substituição do monocromador por um mais moderno, com sistema de resfriamento. A instalação da linha como uma linha lateral do *wiggler* é desejável.

2) D04B:XAFS1 – Estrutura Fina de Absorção de Raios-X

Melhorias: Vários melhoramentos para experimentos com tratamento térmico *in situ* foram realizados: um novo porta-amostra de quartzo e um forno de lâmpada de halogênio; um novo forno de resistência para experimentos de transmissão, ambos os casos em vácuo e sob fluxo de gás; um criostato compatível com porta amostra para líquidos. Novo experimento de luminescência de excitação óptica por raios-X (XEOL) está sendo desenvolvido, estando em fase de teste.

Perspectivas: Para viabilizar os experimentos de XEOL será necessário automatizar o funcionamento do goniômetro e do espectrômetro.

3) D06A:DXAS – Espectroscopia de Absorção de Raios-X Dispersivo

Melhorias: Foi instalado um segundo espelho para eliminar harmônicos indesejados. Uma instalação definitiva está agendada para 2007. Uma nova técnica experimental para experimentos em alta-pressão está sendo desenvolvida e utilizará células de pressão de bigorna de diamante ou de carbetto de boro.

Perspectivas: Os principais projetos de melhoramentos são a finalização dos experimentos de alta-pressão, o desenvolvimento das instalações para experimentos de catálise, dentro do programa da rede da PETROBRAS (ver Programa 5) e a instalação de uma bobina supercondutora de altos campos magnéticos (7 Tesla).

4) D09B:XRF – Fluorescência de Raios-X

Melhorias: Um novo sistema experimental combinando condições para emissão com saída rasante e micro-feixe de raios-X foi desenvolvido.

Perspectivas: Um sistema para experimentos de refletividade de raios-X em energia dispersiva está em desenvolvimento.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

5) D10A:XRD2 – Espalhamento e Difração Magnética

Melhorias: A linha de luz continuou sua adaptação para experimentos de difração de raios-X por incidência rasante (GISAXS) e de espalhamento anômalo de raios-X a baixo ângulo (ASAXS). Os primeiros experimentos foram realizados com sucesso.

Perspectivas: Em 2007 está prevista a instalação de fornos com temperatura variando entre 300°C e 1000°C. A automação da linha de luz está prevista dentro do projeto da rede da PETROBRAS.

6) D10B:XPD – Difração de Raios-X em Policristais

Melhorias: Instalação de um sistema IP motorizado acoplado a um forno permitindo a coleta completa de perfis de difração de pó. Um novo forno foi projetado e está em construção que permitirá experimentos na presença de gases. Uma célula de pressão foi desenvolvida e os primeiros testes foram promissores.

Perspectivas: Está prevista em 2007 a substituição de um sistema de curvador (*bender*) do monocromador sagital, o que servirá como teste para uma linha multi-uso a ser construída a partir da luz fornecida pelo terceiro dispositivo de inserção. São ainda necessários para a linha, um detector 1D de estado sólido para medidas de alta resolução e um sistema de múltipla análise.

7) D12A:XRD1 – Difração de Raios-X

Melhorias: Foi construído e instalado um sistema motorizado de ângulo- α para experimentos de difração com incidência rasante. Um pequeno espelho de Si para rejeição de harmônicos em medidas de baixa energia (inferior a 6 keV) está sendo instalado. A automação do procedimento para medidas de tensões residuais está sendo avaliada.

Perspectivas: A principal melhoria prevista é a extensão de energia para o intervalo de 3 keV – 14 keV para experimentos de rotina. Para isto, devem ocorrer a remoção de várias janelas de berilo e kapton e o término da instalação do espelho de Si.

8) D02A:SAXS2 – Espalhamento de Raios-X a Baixos Ângulos II

Melhorias: A linha teve seu comissionamento concluído no início de 2006 e foi aberta parcialmente aos usuários, utilizando propostas submetidas para a linha SAXS1. Ela tem um sistema óptico similar à linha antiga, D11A:SAXS1, devendo assumir a sua demanda.

9) D11A:SAXS1 – Espalhamento de Raios-X a Baixos Ângulos I

Perspectivas: A linha esteve operacional durante o ano de 2006, mas foi desmontada durante a parada de outubro-dezembro para dar lugar à linha de luz alimentada pelo ondulator. Atualmente, a linha está armazenada e sua remontagem em outra saída de luz de dipolo está em análise pelo Comitê Interno de Linhas de Luz.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

10) D04A:SXS – Espectroscopia de Raios-X Moles

Melhorias: Essa linha de luz tem vários problemas técnicos e nunca atingiu uma demanda satisfatória. Uma reforma geral foi aprovada visando melhor atender os usuários nessa faixa de energia. Dois módulos de fenda refrigerados e motorizados e um novo módulo de filtro foram instalados. Um novo par de cristais de quartzo para o monocromador foi comissionado e um par de cristal de YB₆₆ foi caracterizado.

Perspectivas: Um novo monocromador DCM permitindo até quatro cristais refrigerados está sendo adquirido. Este será o primeiro monocromador a ser adquirido comercialmente. Um novo espelho, com incidência de 0,6 graus e revestimento de Ni, está em processo de aquisição. Estas modificações permitirão ampliar o alcance de energia de 1 keV até 6 keV, eliminando um *gap* importante na região de raios-X moles existente hoje no LNLS.

11) D05A:TGM – Monocromador de Grade Toroidal

Melhorias: Foi comissionado um novo sistema de filtro de harmônicos à gás, desenvolvido no laboratório. Com esse filtro, foi possível eliminar os harmônicos (até o décimo) em uma parte em 10⁵ na região de energia de 12 eV até 21 eV.

Perspectivas: Uma proposta para instalação de grade para incidência normal em baixa energia está em análise, o que permitirá a extensão do intervalo de energia para 5 eV até 40 eV com resolução de 5000. Uma alternativa considerada é o desenvolvimento de duas ramificações para a linha de luz, o que reduziria o custo desta instalação.

12) D08A:SGM – Monocromador de Grade Esférica

Melhorias: A linha de luz foi completamente reformada, tendo esta sido concluída em 2006. Um novo apoio independente do solo foi instalado para melhor estabilidade mecânica. Foi instalado bombeamento diferencial e o sistema de controle de *software* foi atualizado. Novas fendas, espelhos e *encoders* foram instalados. A eletrônica para as válvulas foi atualizada e absorvedores de choque nos transformadores foram instalados no *rack* de serviço. Estas melhorias devem permitir à linha de luz recuperar sua intensidade e resolução original.

Perspectivas: A linha de luz tem alta demanda e, mesmo com a nova linha de luz do ondulator, uma nova linha de luz tipo SGM em dipolo magnético deve ser considerada. A linha de luz ainda precisa de mais bombeamento diferencial. Um par de espelhos de reposição deve ser considerado no futuro.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

Novas linhas de luz

1) W01A:MX2 – espectroscopia de macromoléculas II

Características: Linha de luz baseada na luz fornecida pelo *wiggler*, permite o uso da técnica MAD (*Multiple Wavelength Diffraction*), necessária para a resolução de estruturas originais de proteínas. Está equipada com um detector de raios-X Marmosaic 225 e operará entre 5 e 15 keV com um fluxo de 4×10^{11} ftons/s/mm²/100mA em 8 keV e de $1,5 \times 10^{11}$ ftons/s/mm²/100mA em 12 keV. O gráfico abaixo mostra a caracterização do fluxo da linha de luz.

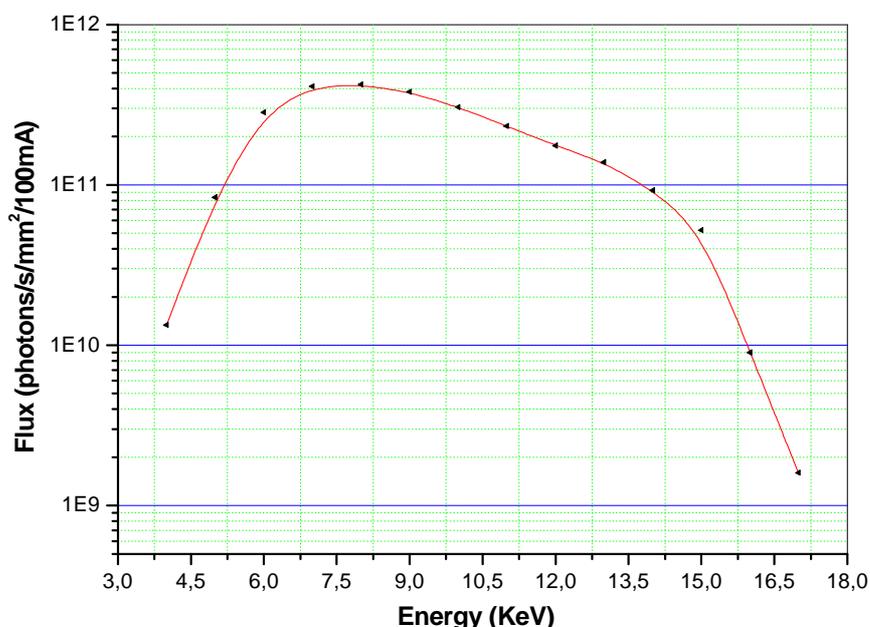
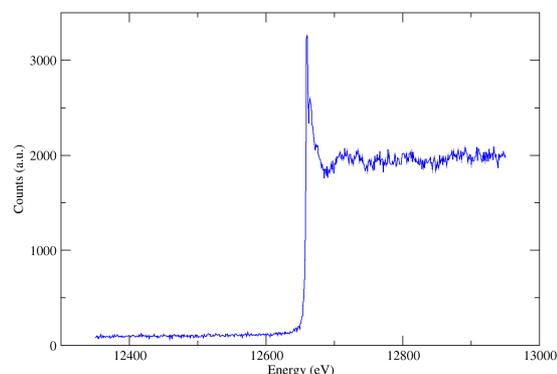
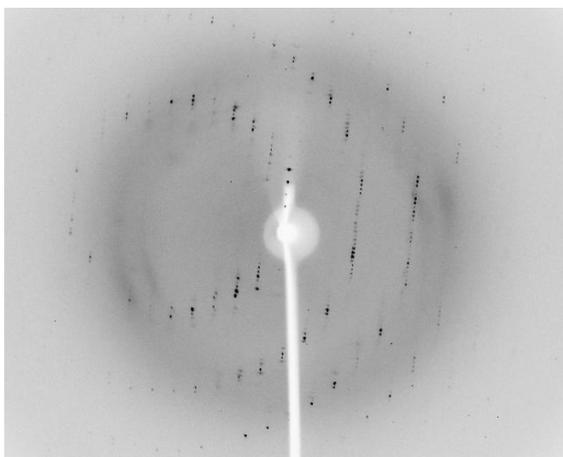


Figura 6: Fluxo em função da energia da linha W01A:MX2.

Comissionamento: A linha de luz foi comissionada em 2006. Houve problemas no sistema de resfriamento do primeiro espelho. Um novo sistema foi projetado e instalado no início de 2006. Em 18 de julho de 2006 os primeiros dados experimentais foram coletados (cristais de lisozima). Em setembro de 2006, pouco antes da parada da fonte de luz síncrotron, testes foram realizados em cristais do gene XF0767 da *Xylella fastidiosa* utilizando técnica MAD pela primeira vez. O final do comissionamento ocorrerá no primeiro semestre de 2007, quando a linha deverá ser aberta aos usuários.



**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006**

Data set	Peak	Inflection	Remote
Wavelength (Å)	0.9795	0.9797	0.9282
Space group	P321	P321	P321
Unit-cell parameters (Å)	a = b = 34.23 c = 140.78	a = b = 34.23 c = 140.81	a = b = 34.23 c = 140.78
Resolution limits (Å)	29.64 – 2.20 (2.32 – 2.20)	29.64 – 2.25 (2.37 – 2.25)	29.64 – 2.25 (2.37 – 2.25)
Completeness (%)	98.2 (98.2)	98.4 (98.4)	98.4 (98.4)
Multiplicity	11.2 (11.7)	11.2 (11.8)	11.2 (11.8)
Rsymm (%)	5.9 (33.3)	6.8 (39.4)	7.2 (42.1)
Mean I / $\sigma(I)$	34.9 (7.3)	31.7 (6.4)	30.4 (6.3)
CC_anom (overall)	0.626	0.499	0.494

Figura 7: Primeiros resultados obtidos na linha de luz W01A:MX2 utilizando técnica MAD. Superior: padrão de difração e espectro de fluorescência do cristal com selênio-metionina medido na borda K do Se. Inferior: Estatística dos dados coletados.

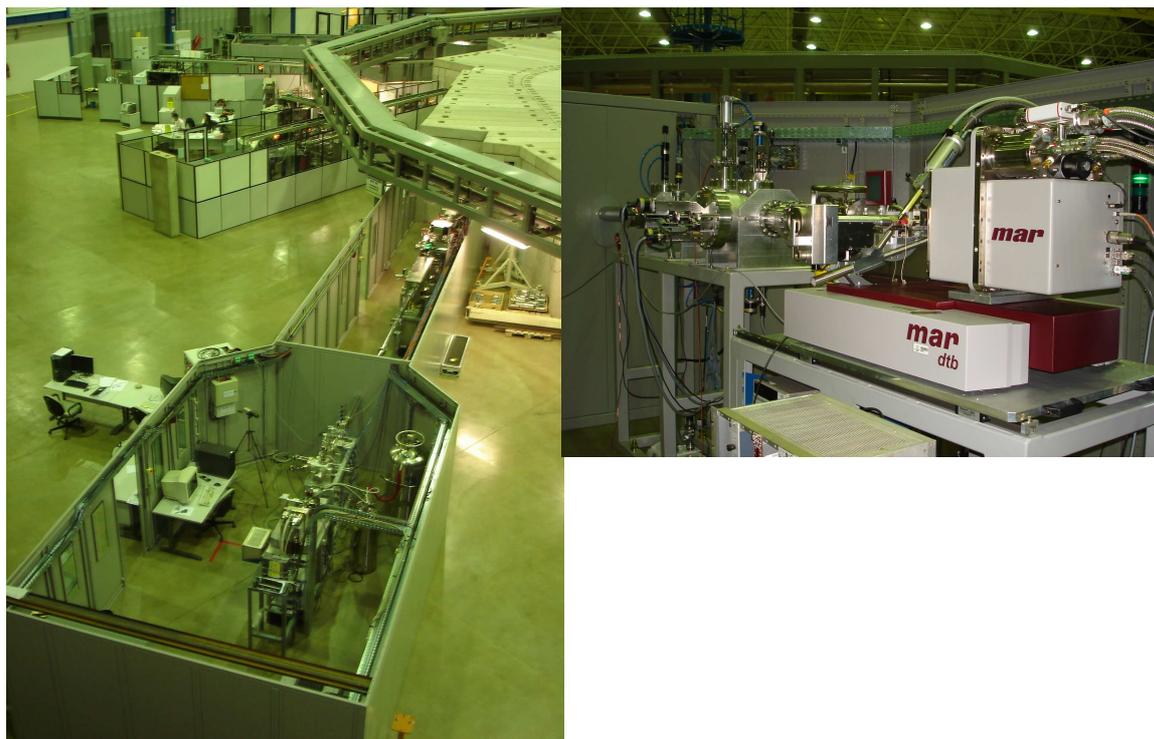


Figura 8: Esquerda: linha de luz W01A:MX2; Direita: Detector de raios-X Marmosaic 225.

2) *D05B:VUVF*: fluorescência no ultra-violeta e visível para biologia

Características: a linha de luz permite experimentos utilizando fluorescência resolvida no tempo, na região entre 2-6 eV e é destinada a aplicações em química e biologia.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Comissionamento: os primeiros experimentos no regime de pacote-único foram realizados em outubro de 2006, permitindo a resolução no domínio de frequências entre 3 até 476 MHz. Em regime de operação de multi-pacotes há limitações para frequências acima de 50 MHz, impedindo a realização dos experimentos. Para resolver o problema, foi instalado um modulador óptico externo (célula de Pockels) cujos testes foram bem sucedidos. A instalação final está prevista para fevereiro de 2007 e a linha deve ser aberta aos usuários ainda no primeiro semestre de 2007.

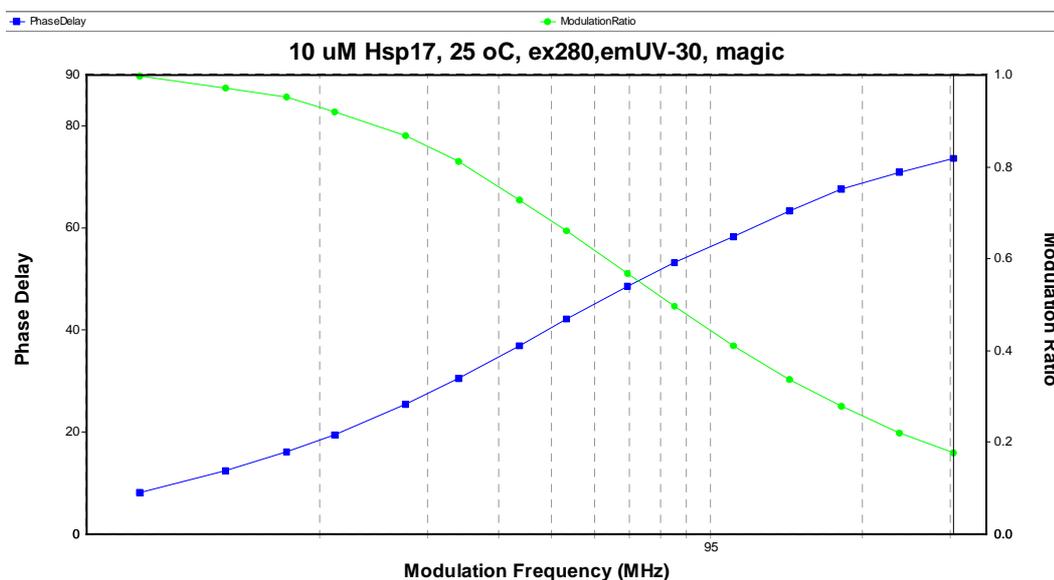


Figura 9: Medidas do decaimento da intensidade de fluorescência da proteína Hsp17 (10 μ M) a 25 $^{\circ}$ C. As linhas sólidas correspondem ao ajuste dos dados a uma exponencial dupla, resultando em tempos de vida de 4,7 ns e 1,7 ns ($\chi^2=1,55$).

3) D08B:XAFS2 – Estrutura Fina de Absorção de Raios-X II

Características: A linha de luz inclui espelho para colimação vertical antes do monocromador, monocromador de duplo cristal de Si(111) e espelho focalizador toroidal. O gráfico abaixo demonstra o ganho de fluxo em relação à linha D04B:XAFS1.

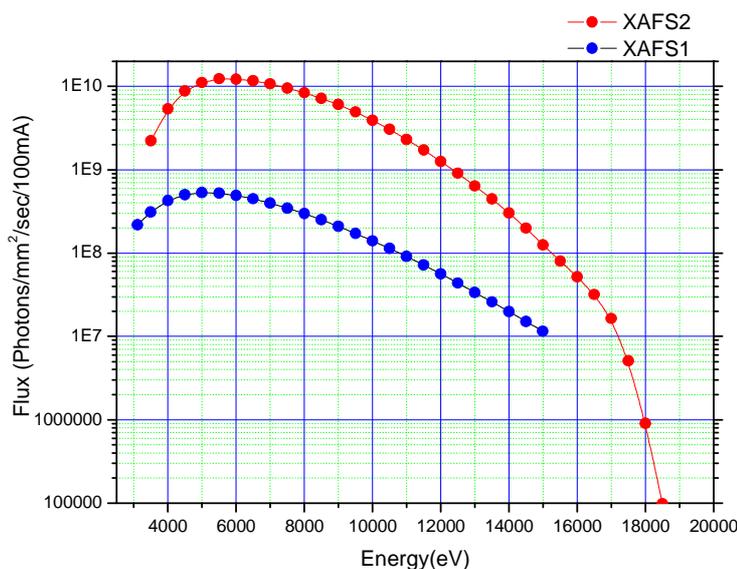


Figura 10: Comparação entre o fluxo das linhas D04B:XAFS1 e D08B:XAFS2 em função da energia. A primeira tem um tamanho de feixe variável entre 0,5 e 0,9 mm^2 enquanto a segunda tem um tamanho fixo de 1 mm^2 .

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Comissionamento: A linha de luz foi comissionada ao longo do ano de 2006, com o monocromador sendo instalado em janeiro-fevereiro de 2006. O comissionamento será concluído no início de 2007 e a linha de luz deverá ser disponibilizada para os usuários em abril de 2007. A linha de luz tem maior fluxo que a D04B:XAFS1 e, portanto, será dedicada para experimentos no modo fluorescência. O detector multi-elemento será transferido para essa linha, sendo necessária a aquisição de um novo detector para a linha D04B:XAFS1.



Figura 11: Linha de luz XAFS2.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

4) U11A: PGM – Monocromador de Grade Planar

Características: A linha foi projetada para operar no intervalo de energia de 100 eV até 1000 eV, com resolução até 20000 em 100 eV, utilizando as características do monocromador de grade planar com espaçamento de linhas variável. A linha de luz prevê duas estações experimentais.

Projeto e Construção: O projeto final da linha de luz foi concluído em 2006 e os elementos ópticos (espelhos e grade VLS) foram encomendados. A construção da linha de luz deverá ocorrer em 2007 e seu comissionamento está previsto para 2008.

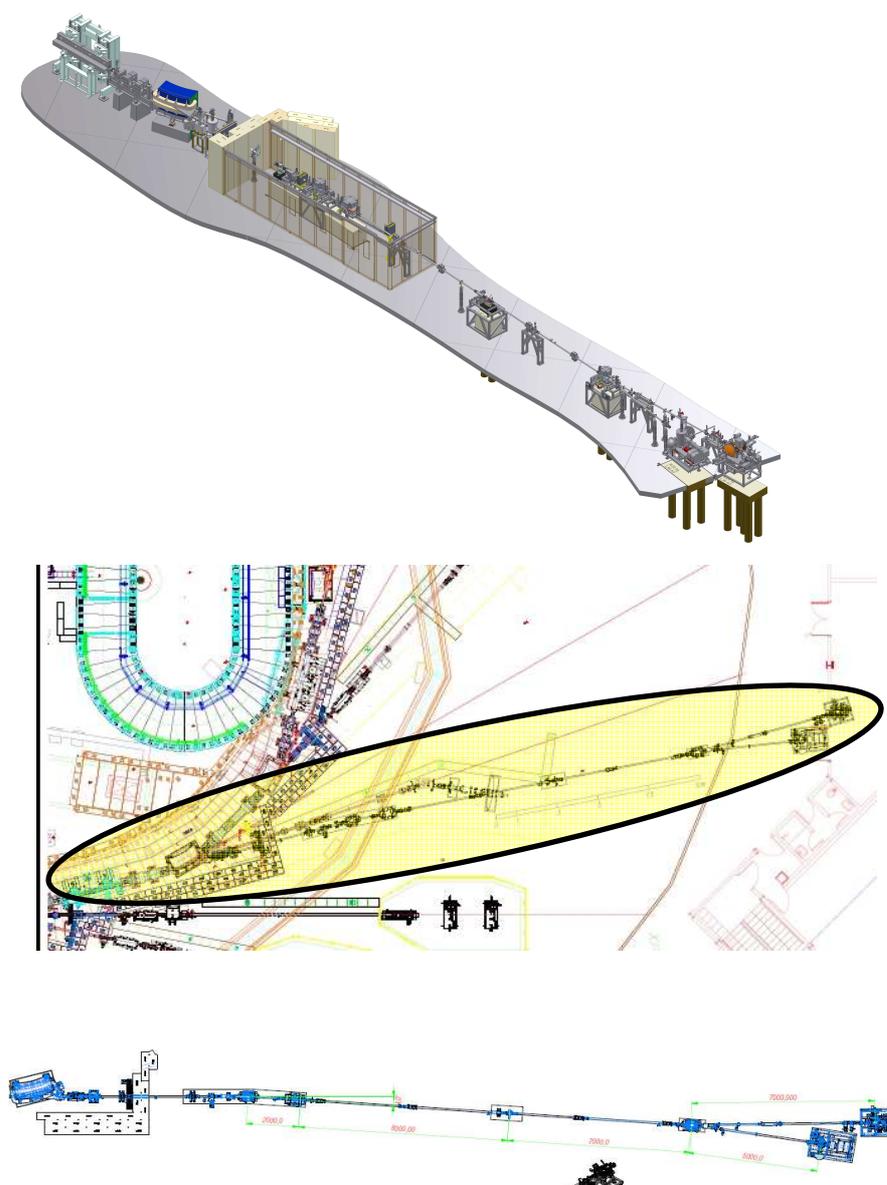


Figura 12: Projeto (superior) e esquema (inferior) da linha de luz U11A:PGM.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Linhas de Luz em Reforma

1) *D06B*: Esta linha de luz (antiga XRL) está em fase de testes para experimentos de radiólise de raios-X de proteínas e footprinting de proteínas. Os experimentos são realizados acoplados ao laboratório de espectrometria de massas. Em 2007 os testes serão avaliados para a decisão de adaptação final da linha de luz. A montagem experimental permite a operação em conjunto com o experimento de dessorção foto-induzida em ultra-alto vácuo com espectro branco (feixe de radiação síncrotron direto do dipolo), para análise qualitativa e quantitativa dos gases e foto-elétrons dessorvidos de amostras de materiais usados na construção de câmaras de vácuo para os aceleradores de partícula ou linhas de luz.

1.3 Uso das Linhas de Luz

Em 2006 foram realizadas 434 propostas de pesquisa nas linhas de luz.

Propostas Executadas nas Linhas de Luz

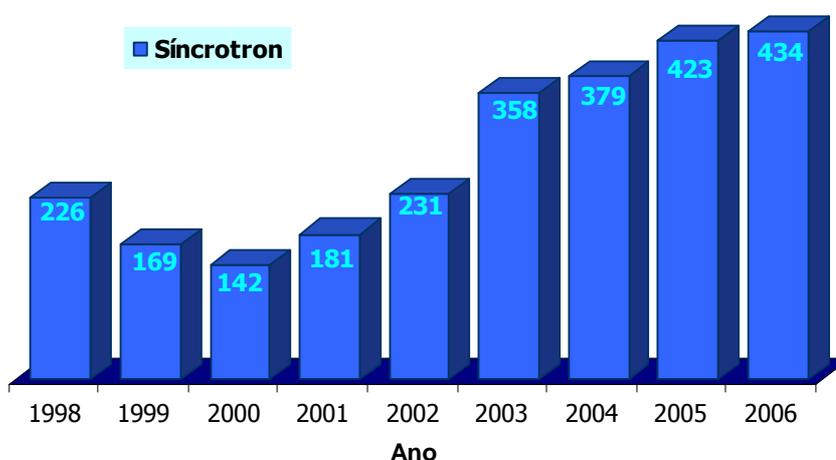


Figura 13: Número de propostas realizadas nas linhas de luz em função do ano.

A evolução geográfica mostra uma crescente participação de pesquisadores de outros estados além de São Paulo, fortalecendo o caráter de laboratório nacional do LNLS.

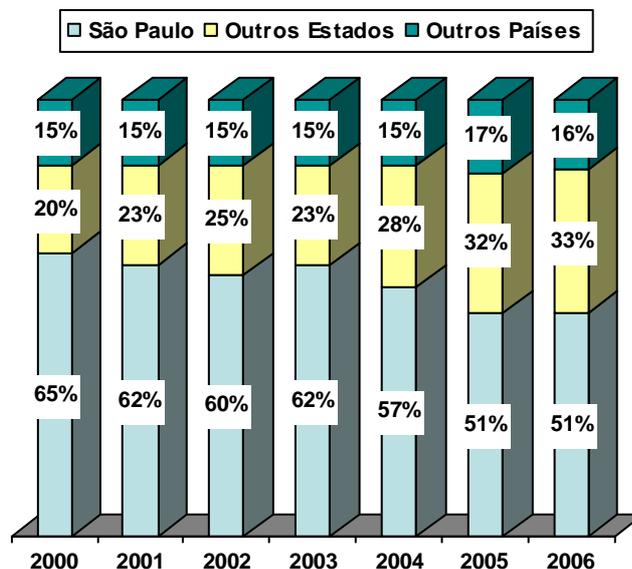


Figura 14: Evolução geográfica do uso das linhas de luz.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

A Tabela abaixo mostra o número de propostas por país, consolidando a Argentina como principal parceiro na utilização de luz síncrotron. Em nível nacional, os estados do Rio de Janeiro, Minas Gerais e o Rio Grande do Sul têm a maior contribuição, depois de São Paulo, refletindo a maturidade de suas comunidades científicas. O Ceará vem a seguir, sendo o estado do nordeste brasileiro com a participação mais significativa.

Linha (2006)	MX1	XAFS1	SAXS1	SAXS2	XRD1	XRD2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
Total realizado nas Linhas	88	49	86	17	26	26	21	17	18	22	34	30	434
Por país:													
Brasil	82	35	75	15	22	21	18	13	12	19	31	23	366
Outros	6	14	11	2	4	5	3	4	6	3	3	7	68
Total	88	49	86	17	26	26	21	17	18	22	34	30	434

Linha (2006)	MX1	XAFS1	SAXS1	SAXS2	XRD1	XRD2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
São Paulo	59	20	52	11	8	10	10	8	7	9	15	15	224
Outros Estados	23	13	23	4	14	11	8	5	5	12	16	8	142
Outros Países	6	14	11	2	4	5	3	4	6	3	3	7	68
Total	88	47	86	17	26	26	21	17	18	24	34	30	434

Linha (2006)	MX1	XAFS1	SAXS1	SAXS2	XRD1	XRD2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
Por outros países:													
Argentina	5	13	10	2	3	1	3	2	5	2	2	5	53
Chile	1							2			1		4
México		1				1				1			3
Alemanha						1						1	2
Estados Unidos da América					1				1				2
França			1			1							2
Bélgica						1							1
Cuba												1	1
Total	6	14	11	2	4	5	3	4	6	3	3	7	68

Por instituição brasileira no Estado de São Paulo:	MX1	XAFS1	SAXS1	SAXS2	XRD1	XRD2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
LNLS	5	9	3	4	1	2	5	8	2	4	1	3	47
UNICAMP	1	3	10	4	1	7	3		1	1	9	2	42
USP- São Carlos	9	5	18	2	1				2	2		1	40
USP - São Paulo	20	1	9		1		2		1		1		35
UNESP - Botucatu	11		2										13
UNESP - São José Rio Preto	9		2										11
USP - Ribeirão Preto	3	2	1		1	1					3		11
UNESP - Araraquara	1		2	1	2							3	9
UFSCar			3						1	2		1	7
IPEN			1									4	5
CENA											1		1
EFOA												1	1
Faenquil					1								1
UNESP - Rio Claro			1										1
Total São Paulo	59	20	52	11	8	10	10	8	7	9	15	15	224

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Por estado / instituição brasileira:	MX1	XAFS1	SAXS1	SAXS2	XRD1	XRD2	SGM	TGM	SXS	DXAS	XRF	XPD	Total
Bahia													
UnEB						1							1
Brasília													
UnB	1	1	2		1			1		1		1	8
Ceará													
UFCE	9	1			2				1	1		2	16
URCA	1												1
Espírito Santo													
UFES					1		1			2		1	5
Mato Grosso													
UFMT		2					2						4
Minas Gerais													
UFMG	3	3	2		4	5	1		1			1	20
CDTN					1	1							2
UFU		1											1
UFV						1							1
Pará													
UFPA					1								1
Paraíba													
UFPA	3												3
Paraná													
UEOP											2		2
UEPG					1								1
UFPR						1							1
Rio de Janeiro													
UFRJ	3	2	6	2		1	2	2	1	1	7		27
CBPF					1	1	2			2		1	7
UERJ					2						5		7
IME			1						1				2
PUC								1				1	2
UFF												1	1
Rio Grande do Norte													
UFRN									1	2			3
Rio Grande do Sul													
UFRGS		3	7	1						2	2		15
PUC - Rio Grande do Sul	3		1										4
UESC								1					1
UFSM			1										1
Santa Catarina													
UFSC			3	1						1			5
Total Outros Estados	23	13	23	4	14	11	8	5	5	12	16	8	142

Tabela 3: Propostas realizadas nas Linhas de Luz.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

P2 - P,D&I em Micro- e Nano-tecnologias

2.1 Infra-estrutura

A infra-estrutura de pesquisa em micro e nanotecnologias do LNLS é organizada nos seguintes laboratórios e grupos:

- Laboratório de Síntese Química de Nanopartículas (LSQ)
- Laboratório de Microfabricação e Filmes Finos (LMF)
- Laboratório de Microscopia Eletrônica (LME)
- Laboratório de Força Atômica e Tunelamento (MTA)
- Grupo de Teoria

Os dois primeiros são laboratórios de síntese de amostras e de processamento de materiais. Enquanto o primeiro atua como um laboratório de pesquisa interna, o segundo tem como principal atuação o apoio aos pesquisadores – externos e internos – funcionando também como laboratório aberto. Os dois seguintes são laboratórios de caracterização, atuando como laboratórios abertos e de pesquisa própria. Finalmente, o último grupo tem como função dar o apoio teórico aos trabalhos experimentais, construir interações entre os pesquisadores em atuação no LNLS e a física teórica brasileira, além de desenvolver projetos próprios de pesquisa.

O novo prédio está sendo construído com financiamento FINEP e, dentro das regras do convênio, através de licitação pública. Atualmente, a previsão da sua conclusão é para o final de abril de 2007, com o início das instalações dos novos microscópios em maio.

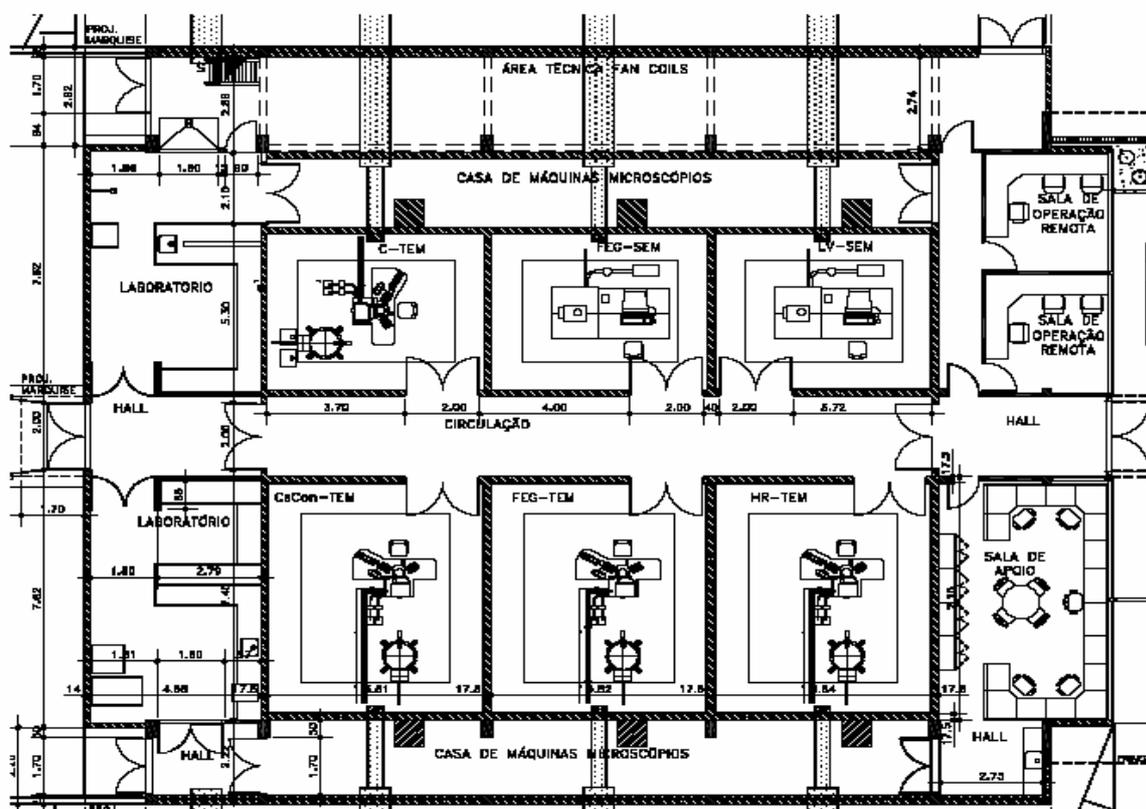


Figura 15: Seção do novo prédio, mostrando as salas para a microscopia eletrônica.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

2.2 Objetivos do Programa.

O primeiro objetivo do Programa é desenvolver e manter um complexo de laboratórios dedicados ao estudo de novos materiais, na escala nanométrica, integrando com o mundo macro, com o objetivo de capacitar a comunidade científica e tecnológica com a instrumentação necessária para desenvolver pesquisas de nível internacional na área. O Programa mantém também agressivo programa de pesquisa própria, o qual tem foco na interação com a indústria, em áreas pré-selecionadas, nas quais a indústria nacional tem um esforço de desenvolvimento tecnológico.

Um programa de pesquisa em nanociência e nanotecnologia deve contemplar as seguintes áreas: a) síntese, b) caracterização e análise, c) manipulação e integração, d) aplicações, e) teoria, modelagem e simulação. O LNLS tem por vocação atuar na área de caracterização e análise onde ele tem por missão manter instalações em nível de competição internacional. A manutenção do esforço em microtecnologia está associada à necessidade da integração entre o mundo nanométrico e o mundo macroscópico. O Brasil não possui um esforço coordenado em síntese de materiais nanoestruturados, que é, junto com a caracterização, fundamental no desenvolvimento de um programa nacional de nanociência e nanotecnologia. O LNLS desenvolve um esforço em síntese para atender seus próprios programas de pesquisa, em particular quando associado a projetos industriais, e não tem a missão de tornar-se uma instalação aberta em síntese de materiais. No entanto, a tendência da pesquisa na área exige cada vez mais a caracterização *in situ*, combinando a caracterização com a síntese de materiais. Isto tem levado a um esforço maior na área de síntese por parte do LNLS, mas focada neste aspecto.

O Programa de M&N do LNLS ramifica-se em duas áreas principais: i) caracterização e ii) instrumentação, e uma terceira em desenvolvimento, apoiada nas duas primeiras que é a iii) fabricação. A caracterização, como já discutido, é a primeira vocação do laboratório. A instrumentação apóia-se na existência de uma capacidade única no LNLS de desenvolvimento de instrumentação científica, conseqüência da capacidade desenvolvida na construção da fonte de luz síncrotron, suas linhas de luz e estações experimentais. Esta capacidade permite o desenvolvimento de experimentos diferenciados, o que abre grandes possibilidades no desenvolvimento de projetos de pesquisa. Finalmente, como mencionamos, a fabricação e síntese começam a tornar-se uma necessidade para o desenvolvimento de experimentos *in situ*, evolução necessária na caracterização dos materiais.

O programa tem quatro objetivos principais: 1) operar um conjunto de laboratórios como instalações abertas, multi-usuárias, 2) treinar recursos humanos, 3) desenvolver novas metodologias e instrumentação científica, e 4) manter um programa de pesquisa interno competitivo e que apóia-se no conjunto de instalações experimentais existentes.

2.3 Atividades

I) Caracterização

1) Laboratório de Microscopia Eletrônica

a) Novos equipamentos: Foram adquiridos dois novos microscópios: um FEG-TEM/STEM 200 kV com capacidade para experimentos de espectroscopia de perda de energia de elétrons (EELS – *electron-energy loss spectroscopy*) e um TEM 200 kV convencional. O FEG-TEM/STEM tem como objetivo desenvolver técnicas de nanoanálise enquanto o convencional será dedicado a projetos de ciências dos materiais, experimentos *in situ* e treinamento de usuários. Ele

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

absorverá projetos que hoje são desenvolvidos no TEM 300 kV, o qual será dedicado a projetos que requerem a precisão deste equipamento. Os novos microscópios serão instalados no novo prédio.

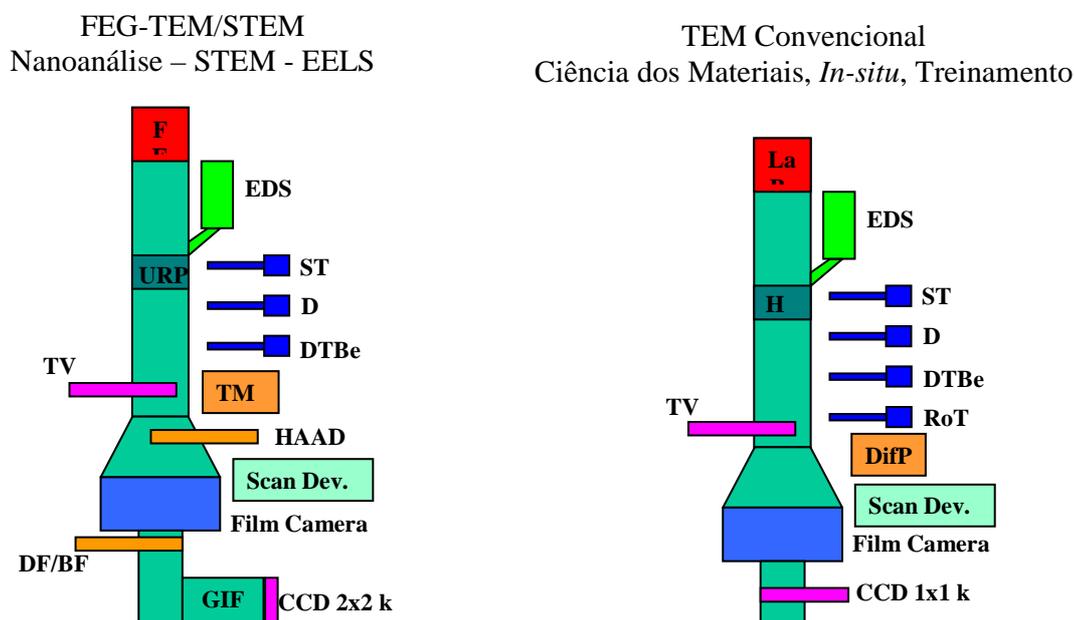


Figura 16: Novos microscópios adquiridos através de financiamento FAPESP.

b) *Perspectivas*: Vários equipamentos estão previstos para os próximos anos, para permitir o LME manter o nível de competitividade internacional. Destacam-se: 1) para melhorias no sistema de preparação de amostras estão previstos a aquisição de um sistema de baixo custo FIB (*Dual Beam*) e um sistema de eletro-polimento para EBSD (difração de elétrons retro-espalhados); 2) para ampliar as capacidades de resolução de microscopia considera-se a aquisição de um microscópio FEG-STEM com correção de cromaticidade, permitindo resolução abaixo de 1 Å; 3) finalmente, para melhorar o atendimento aos usuários, está sendo desenvolvida a capacidade para operação remota, o que permitirá, em um primeiro momento, o treinamento dos usuários em grandes distâncias sem a necessidade do deslocamento e até mesmo a operação remota para o desenvolvimento de pesquisas. Para isto, o LME já participa de um esforço com o grupo de apoio à informática do LNLS no projeto RinGrid.

c) *Usuários*: O número de propostas realizadas no LME continua aumentando. No entanto, apenas o FEG-SEM dispõe ainda de capacidade para aumentar o seu atendimento.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006



Figura 17: Número de propostas realizadas no LME por ano.

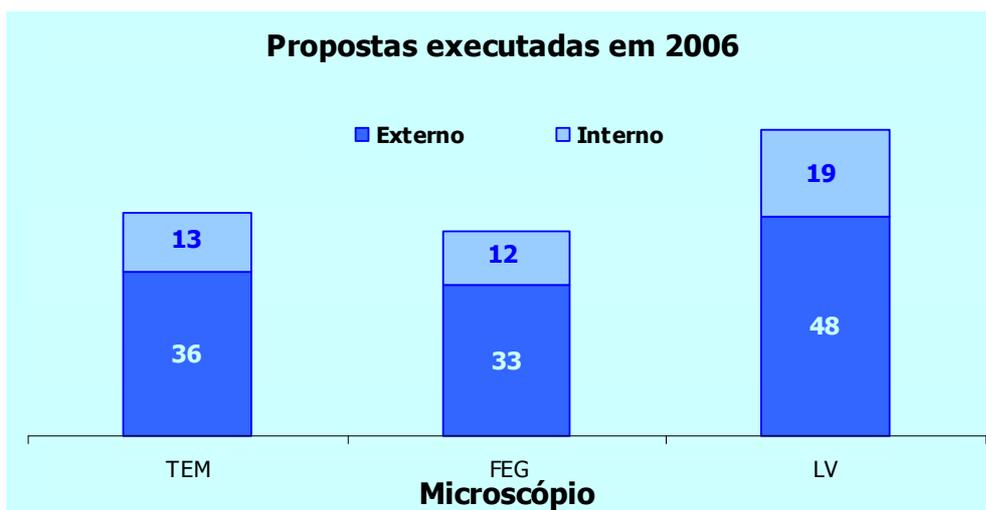


Figura 18: Propostas realizadas para cada microscópio eletrônico no ano de 2006.

2) Microscopia por Tunelamento e Força Atômica

a) *Equipamentos*: está em desenvolvimento a técnica de microscopia por força atômica no modo cruzado. Para isto, um estudante foi treinado na técnica e a está implementando no MTA. O novo microscópio de força atômica apresentou defeito de origem e foi enviado ao fabricante para correção.

b) *Usuários*: Dezenove propostas de pesquisa foram realizadas por usuários externos e duas por usuários internos em 2006.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

3) Técnicas de caracterização de rotina

O laboratório tem adquirido várias técnicas de caracterização rotineira. Essas técnicas são necessárias para o desenvolvimento de projetos de pesquisa interna e, principalmente, projetos industriais. Há uma demanda reprimida e solicitações por parte dos usuários para a utilização desses equipamentos como instalações abertas. Não há, até o presente momento, uma decisão sobre esta questão. Estudos de viabilidade e custo estão sendo considerados. Eles são utilizados, no entanto, como laboratórios de apoio para propostas a serem realizadas nas instalações abertas, evitando assim o uso inadequado dessas. Os laboratórios existentes são: *laboratório de caracterização óptica de semicondutores, difratômetro de raios-X, espectroscopia de raios-X de fotoelétrons (XPS)*.

II) Síntese e fabricação

1) *Laboratório de Síntese Química de Nanopartículas*: laboratório de pesquisa, dedicado à síntese de nanoestruturas de óxidos e de metais.

2) *Laboratório de Filmes Finos*: laboratório de apoio, operado pelo LMF, permite o crescimento de filmes finos metálicos e dielétricos.

3) *Crescimento de Semicondutores*: laboratório de pesquisa, operado pelo MTA, possui uma MBE (*molecular-beam epitaxy*) construída na casa e um sistema de evaporação de Ge *in situ* para nanoestruturas.

4) *Laboratório de Microfabricação (LMF)*: laboratório de apoio e instalação aberta. Sua principal atividade é apoiar os projetos de pesquisas próprias e industriais realizados no LNLS. Serve também de laboratório de apoio para propostas realizadas em instalações abertas. Tem sido utilizado parcialmente como instalação aberta, recebendo suas próprias propostas. Em 2006 foram realizadas 20 propostas no LMF.

III) Teoria e Modelagem

O esforço do grupo de teoria está apoiado em um único pesquisador e seus estudantes e pós-doutores. O grupo está focado na pesquisa em matéria mole (polímeros) e busca o apoio de outros grupos de teoria do Brasil para apoiar as pesquisas realizadas no LNLS.

IV) Instrumentação Científica

Como mencionado anteriormente, uma das vantagens do LNLS como laboratório de pesquisa está na sua capacidade de desenvolver instrumentação científica, consequência da forte base de instrumentação desenvolvida para a fonte de luz síncrotron e as linhas de luz. Esta capacidade tem permitido a realização de experimentos únicos no laboratório. Um esforço mais focalizado foi desenvolvido agora, através de uma rede financiada pelo CNPq e coordenada pelo grupo MTA, que será brevemente descrita abaixo.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Rede NanoSPM

- 1) *Instituições participantes*: LNLS (sede; coordenador Gilberto Medeiros-Ribeiro, vice-coordenador Ana Carolina Zeri), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Universidade Federal de Santa Catarina, Universidade de São Paulo, Universidade Estadual de Campinas, Universidade Federal de Minas Gerais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Centro para o Desenvolvimento de Tecnologia Nuclear (MG). Os participantes são caracterizados como *desenvolvedores* (participantes) e como *usuários* (colaboradores).
- 2) *Apoio Financeiro*: CNPq.
- 3) *Objetivos*: i) diversificar e difundir a utilização de microscópios por varredura de ponta (SPM) e ii) desenvolver uma plataforma básica para a implementação de nano-ferramentas, permitindo a construção customizada de SPMs.
- 4) *Atividades*: i) aquisição de um microscópio de tunelamento em ultra-alto vácuo, com capacidade para controle de temperatura, instalado na UFMG. Atuando como instalação multi-usuária, o microscópio já vem realizando os seus primeiros projetos. ii) Desenvolvimento de instrumentação dedicada para SPMs, focada nos programas de pesquisa da rede, compartilhando a mesma plataforma. Serão desenvolvidos um sistema integrado de *software/hardware* OpenSource GSXM/DSP, um sistema de *scanning* de alta estabilidade e um sistema para manipulação biológica.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

P3 - P,D&I em Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia

O Programa 3 engloba as atividades desenvolvidas na área de Biologia Molecular Estrutural e Biotecnologia realizadas pelo Centro de Biologia Molecular Estrutural (CeBiME). O centro possui um complexo de laboratórios para o estudo das proteínas, desde a clonagem até a definição de suas estruturas tridimensionais e dos estudos funcionais. Seu objetivo preliminar é a investigação de estruturas das proteínas, partindo dos experimentos das linhas de luz de cristalografia de raios-X. A estratégia do centro é agir como uma infra-estrutura nacional, fornecendo à comunidade científica brasileira um complexo de laboratórios para o estudo da estrutura de proteínas por meio da promoção de treinamentos e de realização de projetos de pesquisa que partam dos genomas existentes de organismos de interesse nacional, visando investigar a estrutura tridimensional das proteínas e correlacionando a função da proteína com a estrutura. A metodologia para o programa está baseada em quatro fases:

- a) Fase 1: selecionar áreas de investigação ou de organismos do estudo, criando uma metodologia para a seleção da proteína.
- b) Fase 2: estabelecer rotinas para a clonagem, o arranjo em seqüência, o armazenamento do DNA e estabelecer mecanismos da expressão da proteína em *E. coli* e outros organismos mais complexos.
- c) Fase 3: resolver a estrutura tridimensional por meio da cristalografia de proteínas ou por ressonância magnética nuclear (RMN).
- d) Fase 4: aplicar o conhecimento adquirido em biotecnologia, como por exemplo na busca dos inibidores para proteínas relacionadas às doenças.

A estratégia para desenvolver estes estudos se desdobra em: (a) redes dos investigadores (duas redes na definição da estrutura da proteína, financiadas pela FAPESP e pelo CNPq, e de uma rede de proteoma financiada pela FAPESP-FINEP), (b) um centro virtual de pesquisa (Centro da Biotecnologia Molecular Estrutural – CBME, coordenado pelo Prof. Gláucius Oliva do Instituto de Física da USP-São Carlos, um dos centros do excelência financiados pela FAPESP); (c) programas de pesquisa interna, quando o conjunto de potencialidades do CeBiME deve ser utilizado e d) operando os grandes equipamentos disponíveis como instalações abertas para a comunidade científica.

A seguir são detalhadas as principais melhorias realizadas no CeBiME no último ano.

3.1 - Laboratório de Biologia Molecular (laboratório de pesquisa e apoio)

Esse laboratório é a base para estudo da biologia molecular e é a primeira etapa no processo da determinação da estrutura da proteína. É operado como um laboratório de pesquisa para projetos internos e também como um laboratório de apoio para projetos estratégicos das redes e do CBME-FAPESP. Suas atividades principais são a construção de vetores da expressão, clonagem e seqüenciamento do DNA.

As principais melhorias no período foram: 1) Sequenciador de DNA para verificação dos vetores de expressão, etapa fundamental para o trabalho de clonagem e expressão de proteínas. O instrumento foi comprado e instalado em 2006 (substituindo o sistema ABI377). 2) Expressão do gene: para a identificação de alvos relevantes do gene, um novo

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

sistema de análise, *micro-array*, foi adquirido e instalado em 2006. Este equipamento deverá melhorar significativamente a potencialidade de identificação dos novos alvos de proteínas relevantes para estudos estruturais.

Inicialmente, o *micro-array* será operado como uma instalação multi-usuária limitada aos pesquisadores que submeteram o projeto para financiamento pela FAPESP. Pode evoluir para uma instalação aberta no futuro, após a experiência de operação nesses moldes e análise da viabilidade econômica.



Figura 19: “Micro-array” sistema de análise de DNA.

3.2 - Laboratório de Cristalografia de Proteínas (LCP)

As atividades do LCP são desenvolvidas principalmente pelo grupo de Cristalografia e Espectroscopia de Biomoléculas (CEB). Alguns equipamentos estão disponíveis como instalações de suporte para as redes e o CBME-FAPESP. As linhas de luz associadas estão disponíveis como instalações abertas.

O grupo é responsável pela operação das linhas de luz D03B: MX1 e W01A: MX2 e difratômetro convencional de raios-X. Estas instalações foram descritas no Programa 1.

A principal melhoria no período foi a constituição de um novo laboratório de cristalização de proteínas automatizado com dois robôs: 1) um *Matrix Maker*, para preparação das soluções de cristalização e 2) um *Honeybee* para preparação das placas de cristalização. Tais equipamentos proporcionarão o aumento da eficiência dos ensaios de cristalização, reduzindo a quantidade de amostras necessárias e o tempo para a preparação dos ensaios, além de aumentar a reprodutibilidade dos experimentos. Ambos iniciaram sua operação no segundo semestre de 2006 para projetos de pesquisa interna e usuários das Redes e do CBME-FAPESP. Como parte das instalações dos robôs, foi construída uma nova sala com controle de temperatura operando em 18°C. Com isto, o CEB conta hoje com três salas com controle de temperatura para a cristalização de proteínas, sendo duas que operam a 18°C e uma a 4°C, e seis microscópios (lupas) para análise de cristais.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

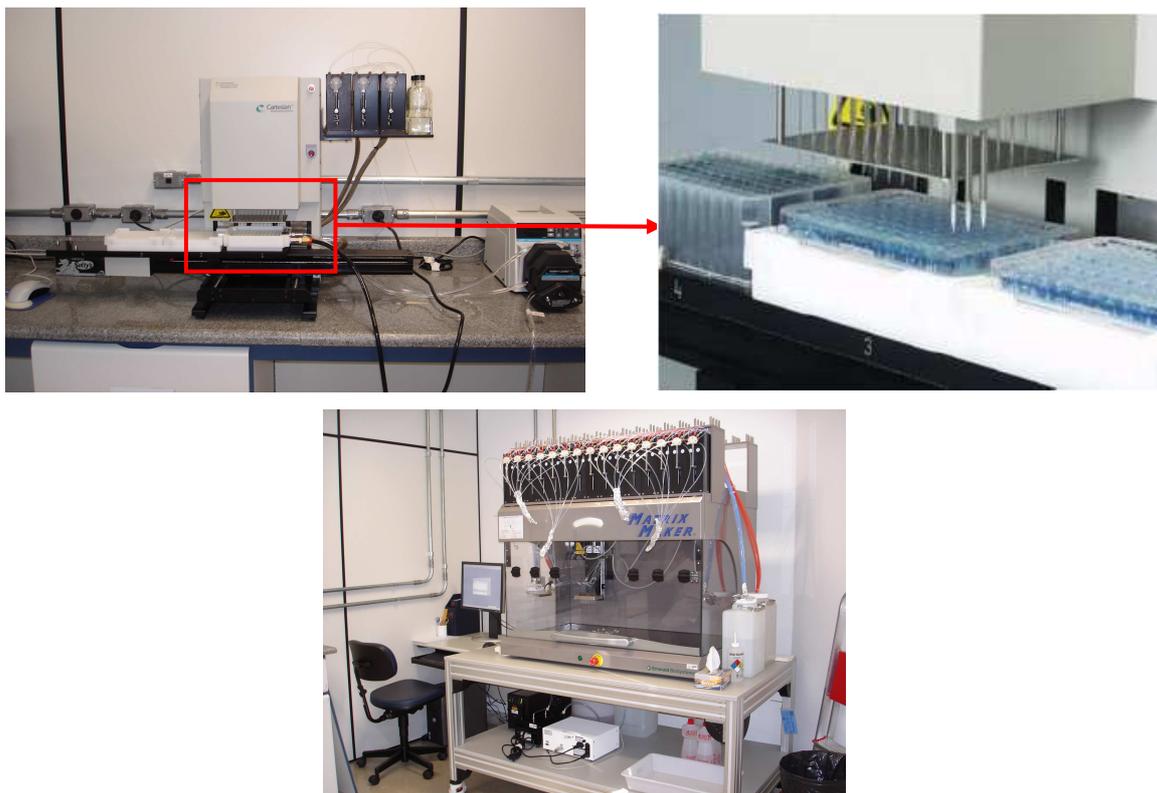


Figura 20: “Honeybee” (painel superior) com destaque ao dispositivo distribuidor (direita superior) e os robôs de “MatrixMaker” (painel inferior) para a cristalização automatizada de proteínas.

O gráfico a seguir apresenta o uso inicial dos robôs para a cristalização de proteínas:

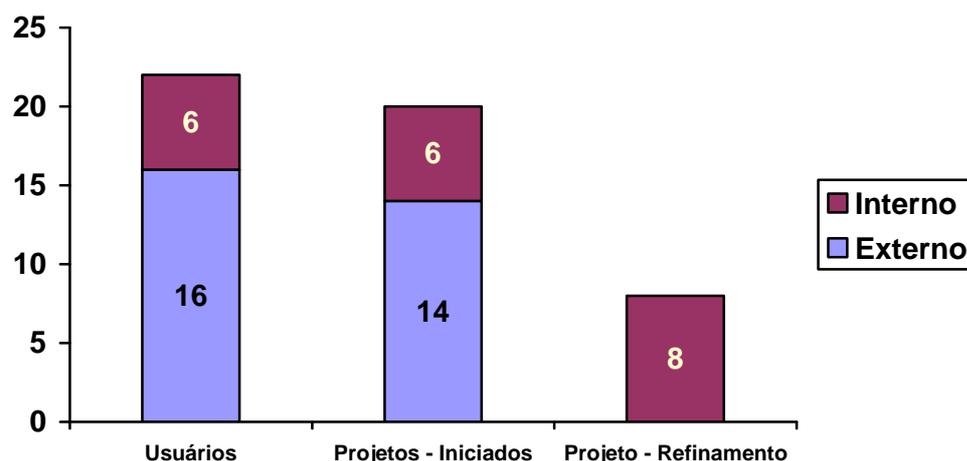


Figura 21: Projetos desenvolvidos com uso dos robôs de automação para cristalização de proteínas em 2006.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Foi adquirido um difratômetro convencional de raios-X, com gerador Rigaku ultra X-18HF, com anodo rotatório de Cu e equipado com detector tipo placa de imagem Mar345. Ele foi instalado e comissionado e operará como uma instalação de apoio à cristalografia de proteínas, tendo como objetivo permitir a continuidade dos trabalhos de cristalografia durante as paradas longas da fonte de luz síncrotron e absorver tarefas mais simples, como testes de cristalização, liberando a linha de luz MX1 para tarefas mais exigentes.



Figura 22: Gerador de raios-X Rigaku.

3.3 - Laboratório de Espectroscopia e Calorimetria (LEC)

Esse laboratório está envolvido principalmente com pesquisas de proteínas e visa oferecer a sustentação básica para averiguar qualitativamente a capacidade de purificação e caracterização inicial das proteínas. Também é capaz de proporcionar estudos avançados da estrutura, função e da dinâmica (com aplicações na proteína-proteína e nas interações da proteína-ligantes). Opera-se como laboratório de pesquisa para projetos internos e também como laboratório de suporte para projetos estratégicos das redes e no CBME-FAPESP.

As principais melhorias no período estão relacionadas à conclusão de construção e instalação da linha de luz VUVF descrita no Programa 1. Outras melhorias foram realizadas na disposição dos equipamentos e acomodação das bancadas.

3.4 - Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear (RMN)

O LRMN teve sua reestruturação iniciada em 2005. Um novo pesquisador foi contratado para reverter a situação insatisfatória existente. Em 2006, com a chegada do novo coordenador e formação de uma nova equipe para o laboratório, as atividades foram retomadas com uma nova metodologia de trabalho e os resultados devem começar a aparecer já nos próximos anos.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Sob a perspectiva dos equipamentos foram mantidos operacionais os dois espectrômetros (500 MHz e 600 MHz). Foi adquirido um sistema *cryo-probe* que deverá ser instalado no espectrômetro de 600 MHz. Esse sistema possibilitará ampliar as potencialidades do atual espectrômetro para medidas equivalentes a um espectrômetro convencional de 800 MHz, principalmente no que se refere ao tempo de aquisição e de definição das informações.



Figura 23: Infra-estrutura do “Cryo-Probe”.

Foi realizada uma chamada para submissão de propostas de pesquisa em 2006, mas o resultado foi abaixo das expectativas. Uma nova abordagem deverá ser estudada visando o fortalecimento do uso das instalações e ampliação da demanda de usuários. A Figura 24, a seguir, apresenta o uso dos espectrômetros em 2006, refletindo ainda o período de transição.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

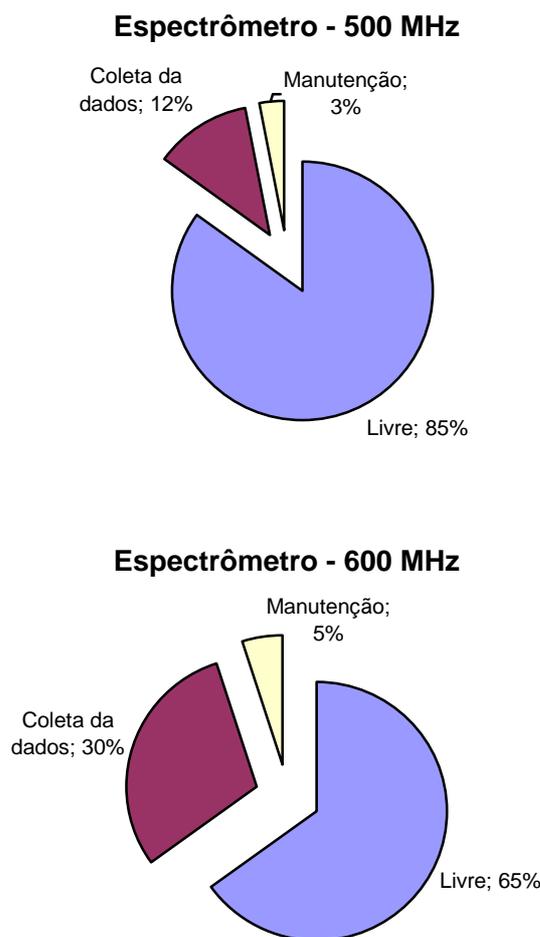


Figura 24: Ocupação dos espectrômetros de Ressonância Magnética Nuclear em 2006.

3.5 - Laboratório de Espectrometria de Massas (MAS)

O foco principal do laboratório de MAS é contribuir para a compreensão das funções das proteínas e na definição dos alvos para o estudos de suas estruturas.

O grupo é responsável pela coordenação da seção do Estado de São Paulo da Rede Nacional de Proteoma. Até o momento, em que pese o convênio estar assinado desde o final de 2004, não foi possível iniciar efetivamente a rede. As principais dificuldades de operação da rede estiveram relacionadas: (1) ao problema de funcionamento e desempenho do espectrômetro MALDI-TOF/TOF quando submetido a uma rotina de análises contínuas. Após várias tentativas de conserto do defeito, desde o início de seu funcionamento, e da troca do equipamento, a empresa responsável reembolsou ao LNLS o valor investido no equipamento. Após as definições técnicas um novo equipamento de outra empresa foi adquirido e instalado em novembro de 2006 e está em comissionamento; (2) a impedimentos administrativos do acordo FAPESP-FINEP para a operação da rede. Essa, finalmente, teve um novo começo no final

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

de 2006, mas é outra vez objeto de questionamento. Ações integradas com a FAPESP e a FINEP estão em curso para resolver as pendências entre ambas agências.



Figura 25: Espectrômetro de massa MALDI MS/MS adquirido para substituir o equipamento defeituoso.

A operação como instalação aberta, no entanto, foi preservada para um conjunto de propostas de pesquisa submetidas para o espectrômetro Q-TOF. É interessante observar que há uma demanda forte por tempo do Q-TOF, em particular de outros estados fora de São Paulo (mais de 40%). Nesse sentido, um dos maiores desafios ainda está no treinamento de usuários, que foi mantido ativo como parte da estratégia de captação de novos usuários com um curso de 2 dias sobre espectrometria de massas, com foco nas principais técnicas da instrumentação e da sua aplicação na área de proteínas. O gráfico a seguir resume a demanda por propostas:

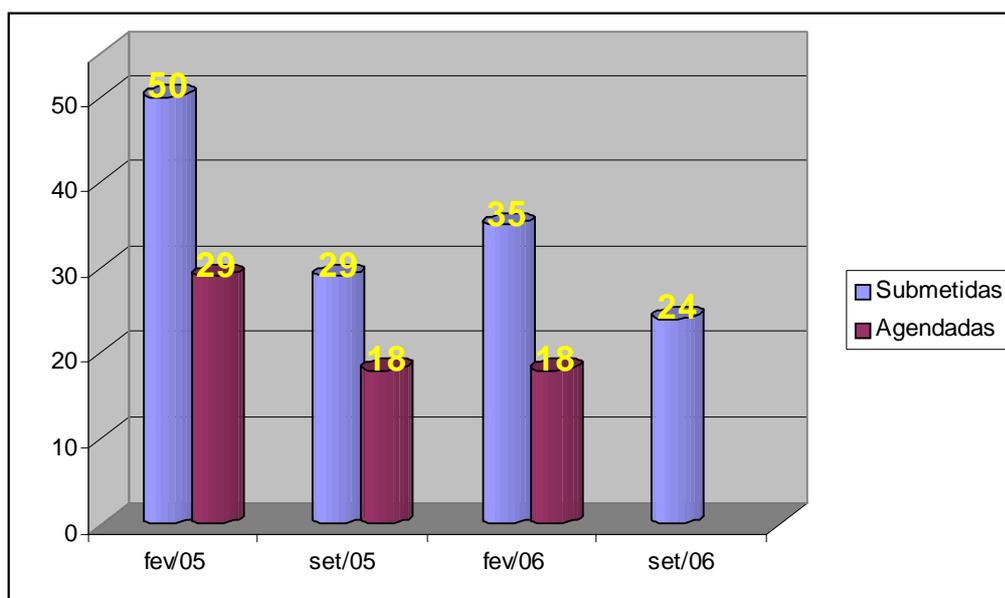


Figura 26: Propostas submetidas e executadas nos espectrômetros de massa.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

3.6 - Projetos Institucionais e Resultados

1) *Rede Nacional de Biologia Molecular Estrutural – ReNaBiME*: a rede nacional teve seus trabalhos concluídos em fevereiro de 2006 e pouco foi realizado nesse ano. Iniciada em fevereiro de 2004, a rede contou com 10 grupos de pesquisa de diversos estados brasileiros, mas com recursos limitados (R\$ 1.200.000,00 para toda a rede durante os dois anos). Ela foi co-coordenada pelo CeBiME-LNLS e pelo Centro Nacional de Ressonância Magnética Nuclear da UFRJ-RJ. Como resultado dos trabalhos, em torno de 20 artigos científicos foram publicados pelos grupos participantes. Atualmente, há uma demanda por renovação ou organização de uma nova rede nacional por parte de alguns grupos de pesquisa. Esta decisão, no entanto, depende ainda da construção de um caso científico concreto que justifique a formação da rede e a obtenção de recursos para a operação dessa.

2) *Rede de Biologia Molecular Estrutural do Estado de São Paulo – SmolBNet*: a SmolBNet deverá encerrar seus trabalhos em março de 2007. Iniciada em outubro de 2000, ela envolveu 14 grupos de pesquisa do estado de São Paulo. Seus resultados podem ser resumidos na Tabela abaixo:

Publicações	2001	2002	2003	2004	2005	2006	Total
Total/ano	-	21	39	67	63	70	260
Relatórios de cristalização	-	6	5	12	12	9	44
Estruturas resolvidas	-	5	9	6	12	9	41

Participantes	Líderes de Grupos	Pós-doutores	Estudantes de doutorado	Estudantes de Mestrado	Estudantes de Graduação	Assistentes Técnicos	Total
	24	35	75	20	43	9	206

Tabela 4: Resumo dos resultados da SmolBNet e pessoal envolvido.

Finalmente, os resultados obtidos no CeBiME compõem os indicadores gerais do laboratório. Além destes, um indicador da produção científica de um centro focalizado na biologia molecular estrutural é o número de proteínas resolvidas no laboratório. A Tabela 5 apresenta o número de estruturas de proteínas liberadas no banco de dados da proteína (PDB) para a qual os dados foram coletados no LNLS. O ano refere-se à data de depósito dos dados, sendo que a liberação pelo autor pode ocorrer meses ou mesmo mais de um ano depois. Devido a isso, o número para 2006 deve ser considerado com cautela. Apresentamos também uma média dos últimos três anos, o que permite diminuir o peso das flutuações.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Ano	LNLS	Média 3 anos
1995	0	
1996	0	
1997	0	-
1998	0	-
1999	7	2,3
2000	2	3,0
2001	6	5,0
2002	5	4,3
2003	19	10,0
2004	17	13,7
2005	27	21,0
2006	5	16,3
Total	88	

Tabela 5: Número por ano e média em três anos das proteínas liberadas no *Protein Data Bank* que utilizaram o LNLS para a coleta de dados.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

P4 - P,D&I em Aceleradores e Instrumentação

4.1 Melhoramentos na estabilidade do feixe.

A estabilidade da posição do feixe de elétrons é um parâmetro fundamental para o bom funcionamento das linhas de luz. À medida que novas linhas de luz mais complexas e exigentes são construídas e colocadas em operação, os parâmetros de qualidade da fonte devem evoluir continuamente de forma a permitir a realização de experimentos mais sofisticados. Neste sentido, os esforços da força-tarefa da estabilidade do feixe no anel continuaram ao longo de 2006, envolvendo os seguintes aspectos:

(a) Melhorias na Instrumentação: obtenção de melhores medidas de posição do feixe

1. melhorias instrumentais relativas aos monitores de posição do feixe de elétrons (RF BPMs): foi terminada a migração (iniciada em 2005) do sistema de aquisição de dados (conversores A/D) para novos bastidores de rede usando comunicação ETHERNET, com adequada blindagem de RF e melhor imunidade a ruído elétrico. Todos os nós da rede de controle do anel relacionados às medidas de órbita foram atualizados ao final de 2006, permitindo uma melhora significativa na qualidade das medidas;
2. operação rotineira de monitores de posição do feixe de raios-X: estes monitores, desenvolvidos no LNLS e testados ao longo de 2005, entraram em operação contínua a partir de 2006. Atualmente, além da linha de luz de diagnóstico de feixe (DFX) duas outras linhas de luz contam com estes monitores. Os monitores instalados na linha de diagnóstico estão sendo usados para gerar uma figura de mérito de estabilidade da órbita que é acompanhada diariamente pelos operadores da fonte de luz;
3. projeto, construção e instalação de um novo modelo de monitor de posição do feixe de elétrons com resfriamento a água e menos sensível a deformações mecânicas produzidas pela incidência da luz síncrotron;
4. projeto, construção e instalação de nova máscara de resfriamento para estação de bombeamento, visando reduzir movimentações mecânicas dos monitores de posição geradas pelo aquecimento devido à incidência de luz síncrotron;
5. revisão dos sistemas de aterramento dos racks de equipamentos da fonte de luz;
6. melhoramentos contínuos nas ferramentas de análise dos registros de parâmetros da fonte de luz.

(b) Melhorias dos sistemas de correção de órbita

1. novas fontes de corrente para magnetos de correção: foi terminado o desenvolvimento e um primeiro lote de fontes foi instalado no anel de armazenamento. Estas novas fontes permitem correções mais rápidas, são mais leves e de manutenção mais barata que o modelo anterior;
2. início do desenvolvimento de conversores A/D de 20 bits que deverão permitir correções de órbita mais finas;

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

3. mudanças no software de alto nível (uso de diferentes pesos para a correção de órbita permitindo dar mais ênfase às linhas de luz mais demandantes de estabilidade, eliminação de erros de transmissão em leituras e ajustes).

(c) Redução/atenuação de fontes de distorção de órbita

1. implementação de amortecedores de vibração nos suportes de tubulação de serviços para as linhas de luz;
2. desacoplamento mecânico dos transformadores do suporte de tubulações de serviços para as linhas de luz;
3. melhorias nos sistemas de controle de temperatura dos circuitos hidráulicos do anel e linhas de luz;
4. instalação de sistema de resfriamento para o túnel do anel de armazenamento;
5. redução dos transientes térmicos de elementos do anel de armazenamento e das linhas de luz por meio da redução do tempo de injeção (*TOP-UP* em baixa energia): os detalhes deste novo modo de injeção do anel estão descritos na próxima seção.

Foi mantida também uma interação permanente com os coordenadores/físicos de linha, buscando identificar problemas de estabilidade/operacionais na fonte de luz.

4.2 - Melhoramentos no Sistema de Injeção

Um programa de melhorias do sistema de injeção da Fonte de Luz Síncrotron foi iniciado em 2006 visando reduzir significativamente o tempo de injeção. Esta redução é importante não somente para se fornecer mais luz aos usuários, mas também para minimizar o efeito de transientes térmicos em componentes do anel de armazenamento e das linhas de luz, que ocorrem a cada injeção, comprometendo a estabilidade da fonte. O reabastecimento do anel com elétrons ocorre duas vezes por dia, durando da ordem de 30 a 45 minutos, e inclui as etapas de eliminação do feixe armazenado remanescente do turno anterior, ciclagem dos magnetos, procedimentos de segurança, acumulação e rampeamento do feixe e ajustes dos dispositivos de inserção. Uma série de ações foi definida envolvendo melhoramentos da repetibilidade do acelerador linear, ampliação do sistema de RF do síncrotron injetor e diversas mudanças operacionais. Em particular, um novo procedimento (Figura 27) foi desenvolvido ao final de 2006, permitindo a recuperação do feixe remanescente do turno anterior (tipicamente da ordem de 100-130 mA) por meio do rampeamento desde a energia nominal de operação (1,37 GeV) até a energia de injeção (500 MeV), sem a eliminação do feixe, seguido da acumulação complementar (*top-up*) até a corrente nominal de operação (250 mA) e o rampeamento de volta à energia nominal. Este procedimento se tornou a forma de operação rotineira a partir de janeiro de 2007 e deve prover importante redução do tempo de injeção.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

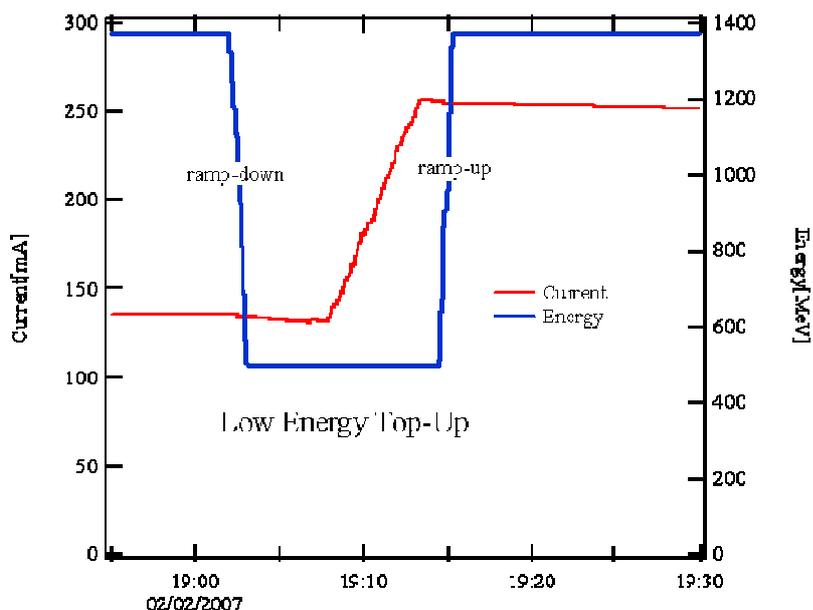


Figura 27: Corrente e energia do feixe durante o novo procedimento de injeção.

4.3 - Atualização do Sistema de Proteção Radiológica do Anel de Armazenamento e Linhas de Luz

Após o término das instalações da nova cobertura de concreto (Figura 28) e blindagens de chumbo localizadas do anel de armazenamento em 2005, monitorações realizadas por vários meses confirmaram nossas expectativas de que os níveis de radiação ionizante em todas as áreas ocupáveis do prédio são compatíveis com parâmetros internacionais para o público em geral, tanto em condições de operação normal para usuários (situação em que os níveis já eram adequados mesmo antes das novas instalações) assim como durante as injeções. Em janeiro de 2006, um consultor externo (Dr. M Hagelstein do laboratório síncrotron ANKA em Karlsruhe, Alemanha) revisou nosso sistema de proteção, analisou os cálculos de projeto assim como realizou medidas em campo confirmando nossos resultados. Além disso, ao longo de 2006, novas implementações foram realizadas nas linhas de luz, como o término da reforma das cabanas experimentais para um novo modelo com paredes metálicas e sistema de intertravamento padrão industrial e a instalação de um novo modelo de obturador gama para todas as linhas de raios X.

A conclusão de todos estes itens permitiu a mudança dos procedimentos de operação e acesso ao prédio do anel a partir de janeiro de 2007, não sendo mais necessária a evacuação de todo o hall experimental a cada injeção. Esta nova forma de operar permite um uso muito mais eficaz das instalações, assim como ajuda a reduzir o tempo total de injeção, eliminando a necessidade do procedimento de *procura* no hall experimental.



Figura 28: Vista da Fonte de Luz Síncrotron após instalação da nova cobertura de concreto.

4.4 - Dispositivos de Inserção

Wiggler Multipolar Híbrido

Ao longo de 2006 o wiggler multipolar híbrido de 2.0 T instalado e comissionado em 2005 esteve em operação rotineira, permitindo o comissionamento da linha de luz de cristalografia de macromoléculas por técnica MAD (MX2), que deverá estar em operação para usuários a partir do primeiro semestre de 2007.

Ondulador Elíptico

Em 2006 foram concluídas a construção, caracterização e otimização magnética do primeiro dispositivo de inserção totalmente projetado e construído nas oficinas do LNLS. Trata-se de um ondulador elíptico baseado em magnetos permanentes com 2,87 m de comprimento, período de 50 mm, gap de 22 mm e otimizado para produzir radiação UV e raios-X moles na faixa de 100 eV a 1 keV. Este projeto foi parcialmente financiado com recursos FINEP.

O magneto foi montado após testes detalhados em protótipos mecânicos e magnéticos, medidas de cada um dos mais de mil blocos magnéticos que o compõem em um sistema de bobinas de Helmholtz e ordenamento destes blocos por meio de um código de computador desenvolvido no LNLS. A caracterização magnética foi realizada com pontas hall e bobina girante em uma bancada desenvolvida no LNLS e já utilizada anteriormente na caracterização do wiggler multipolar. A otimização magnética do dispositivo foi realizada empregando-se diversas técnicas de correção das perturbações magnéticas, incluindo (a) movimentação transversal (por pouca dezenas de microns) de blocos estrategicamente escolhidos (*virtual shimming*), (b) correção ativa (i.e. com eletromagnetos) de integrais de campo, (c) adição de blocos magnéticos às extremidades do dispositivo (*magic pads*), e (d) adição de placas metálicas (*L-shims*) para correção de efeitos de multipolos dinâmicos.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006



Figura 29: O ondulador elíptico (EPU) durante testes na bancada de medidas magnéticas.

A primeira fase da instalação do ondulador no anel de armazenamento ocorreu em novembro de 2006, com a instalação da câmara de vácuo e a implementação de um novo modo de operação do anel de armazenamento. Neste novo modo, de forma semelhante ao que já fizemos anteriormente no comissionamento do wiggler multipolar, criamos uma cintura vertical do feixe de elétrons no centro do trecho reto que receberá o ondulador, de forma a tornar o feixe menos sensível à restrição da abertura vertical representada pela câmara de vácuo do ondulador (que tem apenas 19 mm de altura interna, enquanto as câmaras dos trechos retos têm normalmente 60 mm de altura) e também reduzir o efeito das perturbações magnéticas produzidas pelo dispositivo. A instalação do ondulador propriamente dito deverá ocorrer a partir de fevereiro de 2007.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006



Figura 30: Instalação da câmara de vácuo do ondulador.

Wiggler para Ciência de Materiais

Um novo dispositivo de inserção de alto campo otimizado para produzir radiação na faixa de raios-X duros, em particular entre 10 e 20 keV, para aplicações em ciências dos materiais foi especificado. As especificações técnicas foram derivadas dos casos científicos colocados pela comunidade de usuários, em particular a partir dos resultados de um workshop organizado em julho de 2005 no LNLS, que definiram a necessidade de incrementar o fluxo de fótons por um fator de 100 a 10 keV e um fator 1000 a 20 keV em relação ao fluxo atualmente disponível a partir dos ímãs defletores do anel de armazenamento do LNLS. Após análises técnicas de uma primeira solução baseada em tecnologia de ímãs híbridos (semelhante à usada no wiggler multipolar já em operação no LNLS), ficou claro que campos mais altos e períodos mais curtos só poderiam ser obtidos com o uso de ímãs supercondutores. O dispositivo especificado usa esta tecnologia para produzir campos de 3,5 T com período de 70 mm em um gap livre para o feixe de 12 mm e deverá ser adquirido em 2007. Potenciais fornecedores no mercado internacional foram contatados e suas propostas estão em análise pela equipe do LNLS. O financiamento para este projeto é proveniente da FINEP.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

P5 - Interação com o Setor Industrial

A estratégia para a interação com o setor industrial implementada desde 2001/2002 teve bons resultados e hoje o LNLS mantém em torno de 6-8 projetos de desenvolvimento por ano. Esses projetos envolvem uma participação ativa dos pesquisadores e pessoal técnico do laboratório e estão baseados na construção de um projeto de desenvolvimento tecnológico ou solução de problemas de interesse industrial. Para estas interações, áreas estratégicas são escolhidas em função das competências do LNLS e da capacitação da indústria brasileira, além de investimentos específicos para especializar a instrumentação do LNLS e mesmo formar uma equipe própria para o projeto. Atualmente, a capacidade de abertura de novos projetos nesta linha está praticamente esgotada. É necessário repensar o modelo e buscar alternativas para manter a capacidade de ampliação da interação com a indústria.

A seguir, apresentamos sucintamente os projetos em desenvolvimento.

1) *Hewlett-Packard*: processamento de informação quântica utilizando estado sólido.

Objetivo: desenvolver nanoestruturas semicondutoras em nível de protótipo para processar informação quântica e associar a instrumentação para sua caracterização estrutural, eletrônica, óptica e de spin. O projeto é baseado na Lei de Informática.

Resultados: i) desenvolvimento de cavidades de micro-ondas para controle de polarização; ii) mapeamento do tensor-g de caixas quânticas semicondutoras; iii) desenvolvimento de sistema para mapeamento de campos elétricos de micro-ondas; iv) desenvolvimento de sistema de ressonância elétron-spin com resolução de uma ordem de grandeza inferior aos dispositivos comerciais; v) desenvolvimento de um sistema para caracterização óptica de semicondutores resolvida no tempo.

2) *BOSCH-Brasil – HPFDS*: desenvolvimento da tecnologia para produzir sistemas de distribuição de combustível em alta-pressão (*HPFDS – high-pressure fuel distribution system*).

Objetivo: desenvolver e melhorar métodos de solda para produção em massa de sistemas de combustível em alta pressão no Brasil.

Resultados: Metodologias de processamento foram desenvolvidas. Os resultados permitiram a BOSCH-Brasil dominar o processo e ser reconhecida mundialmente como o centro mais avançado para o desenvolvimento e produção de HPFDS.

3) *D&L Fumos de Solda*:

Objetivo: realizar um estudo amplo das partículas existentes nos fumos de solda e suas conseqüências para a saúde humana.

Resultados: Um relatório específico para cada um dos componentes foi redigido e um relatório sumário está em processo de redação e qual deverá ser referência no estudo de fumos de solda.

4) *GETEC – Catálise*.

Objetivo: melhorar a qualidade dos catalisadores Ni-Raney para hidrogenação de polióis fabricado pela GETEC, os quais têm eficiência baixa quando comparado com catalisadores comerciais importados, e realizar estudos exploratórios para futuros catalisadores utilizando nanopartículas de Ni.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006**

Resultados: Foi possível identificar as principais características do catalisador Ni-Raney fabricado pela GETEC que limitam sua eficiência. O projeto foi encerrado devido à fusão da GETEC com uma companhia alemã.

5) OXITENO – Catálise.

Objetivo: caracterizar e auxiliar no *scale-up* de novos catalisadores comerciais produzidos pela OXITENO.

Resultados: caracterização de alguns catalisadores, contribuindo para ganho de escala dos mesmos.

6) PETROBRA - Catálise

Objetivos: Desenvolver instrumentação científica para o estudo de catálise no LNLS, em particular experimentos *in situ*, para capacitar a rede de pesquisadores promovida pela PETROBRAS a realizar seus estudos.

Resultados: a infra-estrutura principal foi planejada e alguns componentes necessários foram importados.

7) NOVO FILME - Células Combustíveis

Objetivos: Obtenção de células combustíveis a partir de grafite natural nanoestruturado.

Resultados: Um conjunto de moldes foi projetado, fabricado e entregue à empresa para produção em escala industrial (em fase de teste pela Novofilme).

8) PADTEC - Metalização de Fibra Óptica

Objetivos: Desenvolver processo de limpeza para metalização em fibra óptica com incentivo da Lei de Informática.

Resultados: Iniciado no final de 2006 com resultados previstos para o decorrer de 2007.

A Tabela 6 resume os valores financeiros envolvidos nos contratos industriais, incluindo recursos públicos – através de agências de fomento – que compuseram os diversos esforços nestes projetos.

	Ano	
	2005	2006
(A) Contrato entre ABTLuS e MCT	R\$ 21.702.000,00	R\$ 21.349.425,00
(B) Serviços para a Indústria	R\$ 185.346,00	R\$ 99.686,00
(C) Projetos contratados com a Indústria para P&D	R\$ 780.184,00	R\$ 1.872.676,00
(D) Projetos contratados com agencias de fomento para apoiar projetos industriais	R\$ 1.043.350,00	R\$ 1.579.110,00
(E) Total da interação com a indústria (B+C)	R\$ 965.530,00	R\$ 1.972.362,00
Porcentagem do orçamento privado em relação ao orçamento do contrato de gestão (E/A) [%]	4%	9%
Porcentagem do orçamento privado em relação ao orçamento total [%]	2,7%	4,9%

Tabela 6: Recursos financeiros com envolvimento de contratos industriais.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

P6 - Informação, Educação e Divulgação

6.1 – Informação administrativa e científica

Biblioteca

Os serviços oferecidos pela Biblioteca do LNLS foram mantidos de forma regular durante o ano de 2006. Novo projeto para financiamento de compra de livros foi submetido e aprovado pela Fundação de Amparo à Pesquisa no Estado de São Paulo – FAPESP. Atualmente o acervo possui mais de 6.000 livros, além de assinatura de mais de 60 títulos de periódicos estrangeiros. O LNLS manteve o acesso ao Portal de Periódicos da CAPES por intermédio do Ministério da Ciência e Tecnologia.

Tecnologia da Informação e Comunicação

Os principais projetos de desenvolvimento e manutenção da infra-estrutura de tecnologia da informação foram mantidos operacionais durante o ano de 2006, com destaque para o sistema de Gestão das Propostas de Pesquisa – GesPP, que encontra-se em fase de homologação interna. Esse sistema visa automatizar os processos de avaliação, agendamento, vinda do usuário e pós-execução das propostas realizadas no LNLS.

6.2 – Educação e produção científica

Formação e educação

A equipe de pesquisadores do LNLS manteve-se estável durante o ano de 2006 e esteve composta por 23 pesquisadores, sendo 16 pesquisadores em tempo integral e 7 pesquisadores associados. Os pós-doutores em atividade durante o ano de 2006 somaram 20 pesquisadores, sendo 4 no programa 2+3 de pós-doutores do LNLS.

Com o aumento do número de instalações e programas de pesquisa, há necessidade de ampliar o quadro de pesquisadores e esforços nesta direção estão sendo considerados.

Para efeito de cálculo dos indicadores de desempenho pactuados no Contrato de Gestão, são considerados 19,5 pesquisadores, pois os pesquisadores associados são contabilizados na regra de $\frac{1}{2}$ pesquisador.

A força de trabalho da ABTLuS recebeu em média 43 horas de treinamento durante todo o ano de 2006, incluindo cursos de aperfeiçoamento profissional de longa e curta duração.

Durante o ano de 2006 foram orientados 50 alunos de doutorado e de 8 alunos de mestrado. O programa de Iniciação científica foi mantido operacional, com destaque ao PIBIC. As tabelas contidas no Apêndice relacionam nominalmente a equipe de pesquisadores e bolsistas que mantiveram atividade no LNLS durante o ano de 2006.

No mais, foram realizados 4 eventos de treinamento de usuários e pesquisadores, conforme detalhamento na tabela a seguir.

**CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006**

Evento	Responsável	Realização	Participantes
Estudos "In situ" sob condições extremas de pressão utilizando Luz Síncrotron	Flávio Garcia	22/02/2006 a 22/02/2006	45
Genômica e biologia estrutural para aplicações biotecnológicas e médicas	Nilson Ivo Tonin Zanchin	22/02/2006 a 22/02/2006	105
Introdução aos métodos de caracterização estrutural de proteínas	Nilson Ivo Tonin Zanchin	06/07/2006 a 07/07/2006	39
Análise quantitativa em espectrometria de fluorescência de raio x dispersiva em energia	Carlos Alberto Perez	29/11/2006 a 30/11/2006	13

Tabela 7: Eventos e treinamentos realizados no LNLS em 2006.

Finalmente, deve-se registrar a 15ª edição do Programa Bolsas de Verão, realizada nos meses de janeiro e fevereiro com 14 jovens estudantes universitários selecionados entre 252 candidatos e a realização da 16ª Reunião Anual de Usuários, com a presença de mais de 300 participantes.

Produção científica

O banco de dados da produção bibliográfica do LNLS registra até o momento 227 artigos em periódicos indexados, resultantes de pesquisas realizadas nas instalações do Laboratório Nacional. A evolução do número total de publicações pode ser observada a seguir:

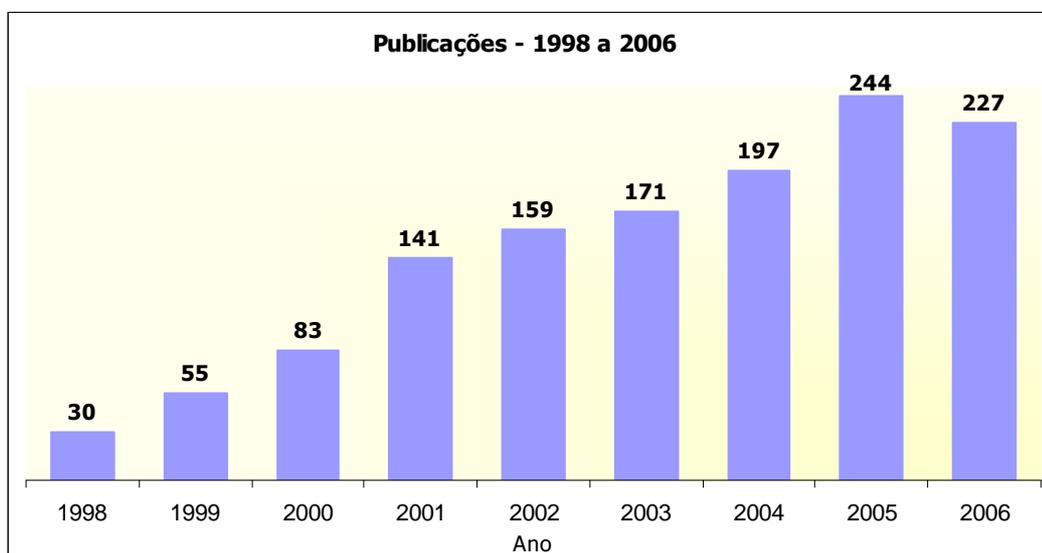


Figura 31: Evolução das publicações em periódicos indexados.

Outro aspecto importante a ser observado é a distribuição das publicações em periódicos indexados, com ênfase naquelas que tem fator de impacto superior a 5, conforme o indicador do Contrato de Gestão.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

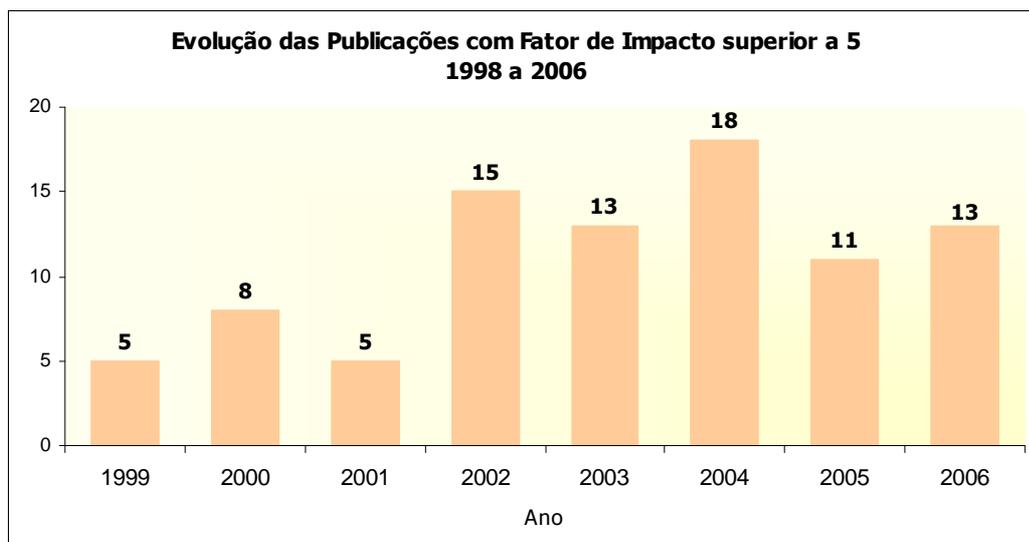


Figura 32: Evolução das publicações com Fator de Impacto superior a 5.

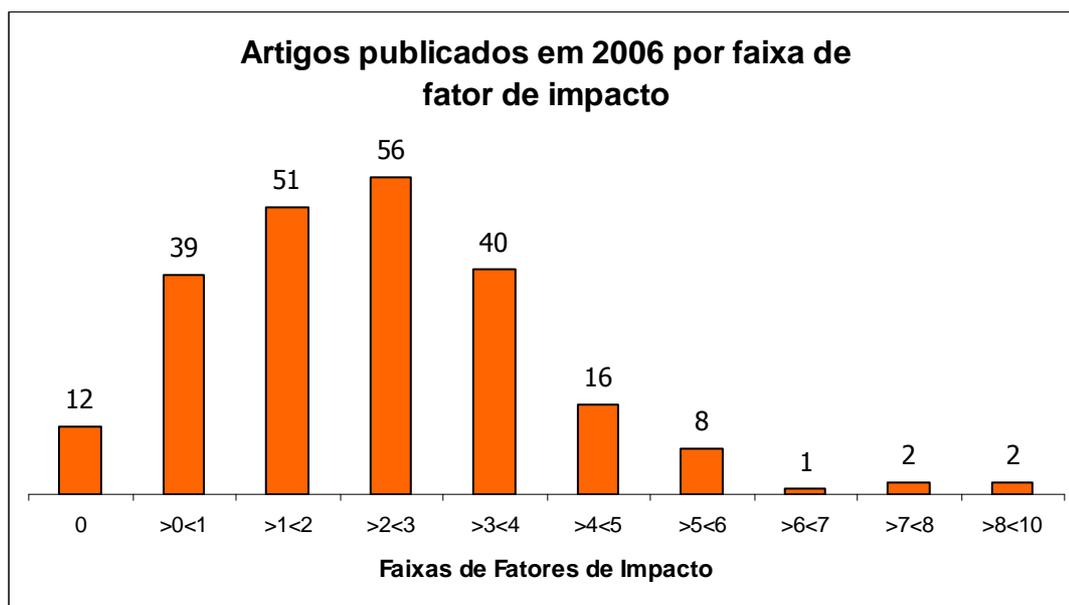


Figura 33: Distribuição das publicações por fator de impacto.

Em recente divulgação no Website do MCT (www.mct.gov.br, acesso em 26/02/2007) foi apresentada a estatística de comparação de padrões internacionais de publicações em periódicos científicos internacionais indexados no ISI. Com base nessas informações podemos observar a relevância e impacto da pesquisa realizada nas instalações do LNLS.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Ano	LNLS	Brasil	Mundo	% do LNLS em relação ao Brasil
1998	30	7.988	710.017	0,38%
1999	55	9.034	724.323	0,61%
2000	83	9.591	721.421	0,87%
2001	141	10.631	740.248	1,33%
2002	159	11.361	736.110	1,40%
2003	171	12.679	800.624	1,35%
2004	197	13.328	770.031	1,48%
2005	244			-
2006	227			-

Tabela 8: Comparação da evolução das publicações em periódicos indexados LNLS x Brasil x Mundo.

Os resultados demonstram a importância do LNLS na pesquisa nacional. A participação relativa da produção científica atingiu um valor estável (em torno de 1,4%) desde 2002 e o LNLS pode acompanhar a evolução da pesquisa brasileira desde então. Com a abertura de novas linhas de luz em 2007 esta porcentagem tende a aumentar nos próximos anos. Mais interessante é observarmos a qualidade dos trabalhos. Há um significativo número de publicações com fator de impacto superior a 4 e mesmo a 5. O fator de impacto médio das publicações em 2006 foi de 2,38. Devemos avaliar estes resultados com cuidado, lembrando que o fator de impacto varia muito entre as diversas especialidades e que a importância dos trabalhos científicos só será conhecida realmente após vários anos.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

P7 - Gestão e Planejamento

Em janeiro de 2006 o Contrato de Gestão da ABTLuS foi estendido por mais 4 (quatro) anos, compreendendo o período de 2006-2009 por meio do 13º Termo Aditivo. Esse aditivo, em particular, está referenciado pelo Plano Diretor 2006-2009 ABTLuS, elaborado durante o ano de 2005 no contexto de Planejamento Estratégico para as Unidades de Pesquisa vinculadas ao Ministério de Ciência e Tecnologia (MCT).

O Plano Diretor descreve as estratégias, programas e atividades do LNLS alinhadas às diretrizes básicas do Ministério da Ciência e Tecnologia e foi aprovado pelo Conselho de Administração da ABTLuS em junho de 2006. Os recursos previstos no Plano Diretor podem ser observados na tabela a seguir:

Valores em R\$ 1.000				
Ação	2006	2007	2008	2009
Fonte de Luz Síncrotron	R\$ 19.500	R\$ 25.000	R\$ 28.800	R\$ 32.500
Biologia Estrutural	R\$ 2.800	R\$ 4.000	R\$ 4.500	R\$ 5.000
Proteoma	R\$ 800	R\$ 1.000	R\$ 1.200	R\$ 1.500
Nanotecnologia	R\$ 2.000	R\$ 5.000	R\$ 5.500	R\$ 6.000
TOTAL	R\$ 25.100	R\$ 35.000	R\$ 40.000	R\$ 45.000

Tabela 9: Orçamento do Plano Diretor 2006-2009.

O orçamento previsto no 13º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, assinado em 25 de janeiro de 2006, no entanto, é inferior ao previsto no Plano Diretor 2006-2009, estando limitado aos valores do Plano Plurianual - PPA, o qual detalhamos na Tabela 10:

Valores em R\$ 1.000				
Ação	2006	2007	2008	2009
Fonte de Luz Síncrotron	R\$ 19.500	R\$ 20.239	R\$ 22.300	R\$ 26.377
Biologia Estrutural	R\$ 2.800	R\$ 2.283	R\$ 2.515	R\$ 2.975
Proteoma	R\$ 800	R\$ 800	R\$ 900	R\$ 1.000
Nanotecnologia	R\$ 2.000	R\$ 2.000	R\$ 2.200	R\$ 2.500
TOTAL	R\$ 25.100	R\$ 25.322	R\$ 27.915	R\$ 32.852

Tabela 10: Orçamento do 13º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, período 2006-2009.

As diferenças nos valores orçamentários entre o previsto no Plano Diretor e a estimativa explicitada no Contrato de Gestão exigem que a ABTLuS procure intensamente ampliar seus recursos orçamentários, através do aumento dos valores previstos no Contrato de Gestão, possível através das revisões anuais do PPA, assim como por meio de alternativas orçamentárias que permitam complementar o orçamento operacional. Neste último caso, ou na contingência de não atingir o orçamento necessário dentro do previsto no Plano Diretor, serão necessárias revisões no planejamento para adequá-lo à existência de novos parceiros ou às restrições orçamentárias.

Por motivos de origens diversas, entre elas a aprovação do Orçamento da União para 2006 apenas em 16 de maio pelo Congresso e adequações internas do Ministério; o 14º Termo Aditivo (TA) do Contrato de Gestão só foi assinado em 22 de junho e o primeiro repasse financeiro ocorreu imediatamente após sua assinatura. Este TA incluiu apenas recursos financeiros referentes à ação da Fonte de Luz Síncrotron, no valor de R\$ 18,482 milhões de reais. O recurso

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

da área de Biologia Molecular Estrutural foi pactuado em julho e dezembro, nos valores de R\$ 2,15 milhões e R\$ 216 mil, respectivamente. A área de Proteoma foi pactuada em julho no valor de R\$ 500 mil. Neste ano os valores foram integralmente repassados dentro do mesmo exercício fiscal. A tabela a seguir sintetiza o orçamento de 2006:

Valores em R\$ 1.000

Contrato de Gestão - ano 2006				
Ação	Plano Diretor	Previsão CG 2006-2009 (TA -13)	Contratado (TA - 14, 15 e 16)	Diferença no ano
Fonte de Luz Síncrotron	R\$ 19.500	R\$ 19.500	R\$ 18.482	- R\$ 1.018
Biologia Estrutural	R\$ 2.800	R\$ 2.800	R\$ 2.367	- R\$ 433
Proteoma	R\$ 800	R\$ 800	R\$ 500	- R\$ 300
Nanotecnologia	R\$ 2.000	R\$ 2.000	R\$ 0	- R\$ 2.000
TOTAL	R\$ 25.100	R\$ 25.100	R\$ 21.349	- R\$ 3.751

Tabela 11: Comparação do Orçamento de 2006.

Apesar desta situação, a ABTLuS operou regularmente o atendimento ao usuário nas instalações abertas com suas reservas financeiras operacionais. A decisão de operar regularmente, no entanto, baseava-se em uma avaliação que o(s) TA(s) manteriam os valores previstos no Contrato de Gestão e medidas internas de contingenciamento foram adotadas no segundo semestre de 2006 visando manter a capacidade de operação da instituição.

No entanto, caso não haja uma expressiva recuperação dos recursos do Contrato de Gestão para o ano de 2007, recuperando os valores previstos no Contrato de Gestão, a situação financeira da ABTLuS poderá ser seriamente afetada com impacto na operação fim da instituição. A direção aguarda a definição dos valores orçamentários de 2007 para definir um plano de contingenciamento para recuperação das reservas financeiras, necessárias para a operação regular da ABTLuS e manter a Associação financeiramente viável. Nos últimos três anos o orçamento do Contrato de Gestão foi praticamente o mesmo, em valores nominais, conforme podemos observar na Figura 34. Esta situação levou a uma perda na capacidade da ABTLuS de ampliar seus quadros e de investir em melhorias nas suas instalações, dependendo exclusivamente de projetos externos para isto. Em 2006, esta situação levou a uma perda efetiva da capacidade econômica das reservas financeiras.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Orçamento do Contrato de Gestão

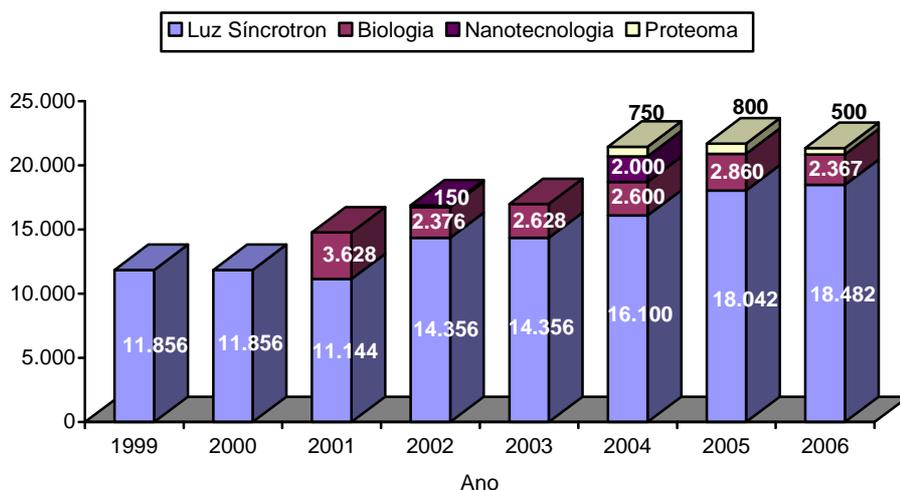


Figura 34: Evolução do Orçamento do Contrato de Gestão, 1999-2006.

As fontes dos recursos financeiros da ABTLuS durante o ano de 2006 foram principalmente dos repasses do Contrato de Gestão, auxílios dos fundos setoriais, convênios, prestações de serviços e rendimentos de aplicações financeiras, conforme demonstrado na tabela a seguir:

(R\$1.000,00)		
Receitas e Despesas - ABTLuS	2006	%
Receitas	39,889	100%
Contrato de Gestão	21,349	54%
Fonte de Luz Síncrotron	18,482	
Biologia Molecular Estrutural	2,367	
Proteoma	0,500	
Nanotecnologia	-	
Outras Fontes	18,539	46%
Vendas, receitas financeiras e outras	3,248	
Pessoal CNPq e Bolsas	2,338	
Agências de Fomento	12,954	
Despesas	R\$ 48,246	100%
Despesas Correntes	R\$ 28,067	58%
Pessoal	R\$ 15,241	
ABTLuS	12,903	
Pessoal CNPq e Bolsas	2,338	
Materiais e serviços	16,790	
Equipamentos fabricados no LNLS ^a	(3,964)	
Investimentos	R\$ 20,179	42%
Edificações e equipamentos	7,225	
Agências de Fomento	12,954	
Resultado do período	R\$ (8,357)	

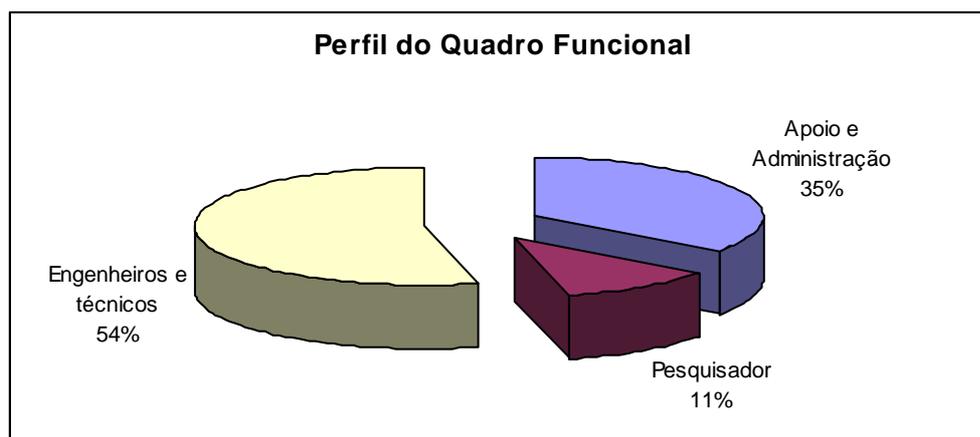
^a Recursos destinados a construção de equipamentos classificados como Investimentos

Tabela 12: Receitas e Despesas – Ano 2006.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

O alto déficit observado representa principalmente perdas contábeis ocorridas no ano de 2006 devido à depreciação de equipamentos e baixa de ativos (espectrômetro de massa). O resultado obtido manteve as reservas financeiras no mesmo nível nominal, o que significou uma perda efetiva em relação aos valores necessários para operar o LNLS. Os gastos com pessoal durante o ano de 2006 representaram 38,2% dos recursos totais recebidos no período, sendo que os gastos com pessoal, realizados com recursos do Contrato de Gestão, representou 60,4% dos recursos recebidos do Contrato.

O gráfico a seguir apresenta o perfil do quadro funcional da ABTLuS no final de dezembro:



Funcionários	212
Estudantes de pós-graduação	58
Pós-doutores	20
Pesquisadores associados	7
Estagiários	32

Figura 35: Perfil da Força de Trabalho.

Finalmente, a ABTLuS cumpriu as responsabilidades de prestação de contas do ano de 2005 previstas no Contrato de Gestão. As demonstrações financeiras foram publicadas no Diário Oficial da União e no Jornal da Ciência. Os relatórios de gestão semestral e anual referentes ao ano de 2005 e o relatório semestral de 2006 estão disponíveis na página da *internet* do LNLS. O processo de prestação das contas da Associação foi verificado *in loco* pela Controladoria Geral da União do Estado de São Paulo no período de 02 a 12 de maio de 2006, apresentando parecer regular com ressalvas.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

INDICADORES DE DESEMPENHO - 2006

Macro - Objetivo	Indicador	Unid.	Tipo	Peso	Pacutado 2006	Realizado 2006
Prover e manter infra-estrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação.	1. Número de horas - linha	U	D	2	53.190	44.093
	2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron	U	D	2	3.940	3.913
	3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)	%	D	3	95%	95%
	4. Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron	%	D	3	90%	119%
	5. Horas de estudo de máquinas e comissionamento	U	D	2	1.400	3.052
	6. Grau de saturação no uso da fonte de luz síncrotron	%	Uso	2	90%	91%
	7. Custo por proposta realizada nas instalações abertas	R\$	D	2	\$ 62.479	\$ 70.638
	8. Número de propostas realizadas	U	Uso	3	722	683
	9. Índice de satisfação dos usuários	%	D/Uso	2	85%	93%
	10. Número total de publicações	U	Uso	4	200	227
	11. Publicações em revistas com Fator Impacto maior do que 5	U	Uso	1	12	13
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	3,5
	13. Taxa de orientação de pós - graduados	Rz	D	2	1,5	3,0
	14. Taxa de supervisão de pós - doutores	Rz	D	3	1,0	1,0
	15. Número de memorandos técnicos disponíveis na Internet	U	D	2	10	10
Implementar e gerir a infra-estrutura da ABTLuS, buscando 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	Uso	2	7	8
	17. Número de técnicos externos treinados	U	D	1	25	32
	18. Número de pesquisadores externo treinados	U	D	3	270	202
	19. Horas de treinamento por funcionário	U	D	1	20	43
	20. Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão	%	D	2	30%	87%

Legenda

Tipo: Uso; D=Desempenho

Unid.: U - Unidade; % - Percentual; Rz – Razão

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

Os programas e atividades do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron – LNLS são orientados por três Macro-Objetivos e acompanhados por meio de indicadores de desempenho e metas pactuadas anualmente no Contrato de Gestão firmado com o Ministério da Ciência e Tecnologia e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. A seguir são comentados os indicadores e o respectivo nível de alcance das metas no ano de 2006.

1 – Número de horas linhas

Pactuado: 53.190 horas linhas

Realizado: 44.093 horas linhas

A meta desse indicador foi repactuada durante o ano de 2006 conforme recomendação contida no relatório de acompanhamento da Comissão de Acompanhamento e Avaliação do Contrato de Gestão.

Em 2006 foram fornecidas 3.687 horas de feixe para usuários de luz síncrotron (operação em modo de multi-pacotes). Durante os meses de janeiro e fevereiro estiveram em operação 11 linhas de luz. Em 14 de março a linha D08A:SGM, que se encontrava em manutenção, foi reaberta aos usuários. Além disso, foram fornecidas 226 horas de feixe no modo de pacote único, neste ano utilizado por três linhas de luz (D04A:SXS, D05A:TGM, D08A:SGM), o que resultou num total de 44.093 horas-linha, correspondente a 83% da meta pactuada. A redução em relação ao número de horas linha pactuado no contrato se deve a problemas técnicos no comissionamento de três novas linhas de luz (W01B:MX2, D08B:XAFS2 e D05B:VUVF) que atrasaram o início efetivo de operações para usuários nestas linhas, reduzindo o número de horas-linha disponibilizado.

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

Período	Horas em Operação	Linhas em Operação	Total de Horas Linhas
Janeiro	340	11	3.740
Fevereiro	317	11	3.487
Março	449	11,6	5.216
Abril	396	12	4.752
Maiο	460	12	5.520
Junho	448	12	5.376
Julho	406	12	4.872
Agosto	430	12	5.160
Setembro	441	12	5.292
Horas no Modo Multi-Bunch			43.415
Outubro	226	3	678
Horas no Modo Single-Bunch			678
Total de Horas Disponíveis			44.093

Tabela 13: Horas-linha fornecidas no ano de 2006.

Fórmula de cálculo:

[Linhas de luz * total de horas de feixe]

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

2. Número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron

Pactuado: 3.940 horas

Realizado: 3.913 horas

A meta desse indicador foi repactuada durante o ano de 2006 conforme recomendação contida no relatório de acompanhamento da Comissão de Acompanhamento e Avaliação do Contrato de Gestão.

Durante o ano de 2006 foram fornecidas 3.913 horas de feixe para usuários de luz síncrotron, o que corresponde a 99% da meta pactuada. No entanto, este valor é menor que o originalmente previsto no plano plurianual 2006-2009 aprovado pelo MCT, que projetava para 2006 a operação para usuários durante fins de semana durante dois meses do ano. Esta meta precisou ser repactuada em função da falta de recursos financeiros para custear este novo regime de operação da Fonte.

Fórmula de cálculo:

[número de horas destinadas aos usuários de luz síncrotron]

3. Confiabilidade (horas entregues/horas previstas)

Pactuado: 95%

Realizado: 95%

A meta foi atingida, confirmando que a operação no novo dispositivo wiggler comissionado em 2005 e que operou rotineiramente durante todo o ano de 2006 não afetou negativamente a confiabilidade da fonte de luz.

Fórmula de cálculo:

[horas entregues no tempo programado/horas previstas]

4 – Desempenho da Fonte de Luz Síncrotron

Pactuado: 90%

Realizado: 119%

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

O índice de desempenho é dado pela média ponderada de três parâmetros operacionais: a corrente entregue no início de cada turno de usuários, a corrente média nos turnos e o tempo de vida médio do feixe. Para cada um destes parâmetros é estabelecido um valor de referência e o índice de desempenho é determinado como um percentual de realização desta referência, com os devidos pesos.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

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, τ é o tempo de vida médio em turnos de usuários e I_{av} é a corrente média ao longo dos turnos de usuários. Os parâmetros I_{i0} , τ_0 , I_{av0} são valores de referência e α , β e γ são os respectivos pesos. Os valores numéricos são:

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

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

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

e os pesos são:

$$\alpha = 3$$

$$\beta = 1$$

$$\gamma = 5$$

Fórmula de cálculo:

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

Memória de Cálculo:

Parâmetro Operacional	Desempenho	Valor Nominal	Peso
Corrente Inicial Média	249 mA	250	3
Corrente Média	191 mA	163	5
Tempo de Vida Médio	19 h	10	1

$$\text{Ind. 4} = \{[(249/250)*3] + [(191/163)*5] + [(19/10)*1]\} / 3+1+5 = 119,4\%$$

O valor obtido em 2006 (acima do pactuado) é resultado do contínuo aumento do tempo de vida do feixe, à medida que prossegue o condicionamento das câmaras de vácuo no anel.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

5 – Horas de estudo de máquina e comissionamento

Pactuado: 1.400 horas

Realizado: 3.052horas

Do total de horas contabilizado neste indicador, 886 horas foram destinadas a estudos de máquina e 2166 horas a comissionamento. No ano de 2006, as horas de comissionamento foram basicamente dedicadas ao condicionamento das câmaras de vácuo do anel (que permitem a melhora do tempo de vida do feixe). As horas de estudos de máquina foram consideravelmente reduzidas a partir de setembro e houve também uma redução das horas de comissionamento nos meses de agosto e setembro. Esta redução foi resultado da necessidade de contenção de gastos no segundo semestre do ano. Nos dois últimos meses do ano, no entanto, em função da instalação de novas câmaras de vácuo (preparativos para instalação do ondulador), foi inevitável retomar o comissionamento.

Fórmula de cálculo:

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

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

Pactuado: 90%

Realizado: 91%

O indicador considera a capacidade de ampliação do tempo de operação da fonte de luz síncrotron.

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

Memória de Cálculo:

Uso da Fonte de Luz Síncrotron	Total Horas
Usuários	3.913 h
Injeção	291 h
Estudo de Máquina	886 h
Manutenção	617 h
Comissionamento	2.166 h
Falhas	136 h
Total em uso	8.010 h
Horas disponíveis	8.760 h
Grau de Saturação	91%

Ind. 7 = $(3.913 + 291 + 886 + 617 + 2.166 + 136) / (365 \text{ d} * 24 \text{ h}) = 91\%$

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

7. Custo por proposta de pesquisa realizada nas instalações abertas

Pactuado: R\$ 62.479

Realizado: R\$ 70.638

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 Microscopia Eletrônica, Laboratório de Força Atômica e Tunelamento, Laboratório de Microfabricação, Laboratório de Espectrometria de Massas e Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear). Nessa metodologia de cálculo o custo por proposta foi maior em 13% do que o previsto e não atingiu plenamente a meta pactuada.

No entanto, o aumento do custo por proposta foi impulsionado, principalmente, pelo nível de alavancagem (ind. 20) de investimentos de fontes de recurso extraordinários ao Contrato de Gestão, fato esse que demonstra a capacidade de captação de recursos da instituição. Nesse sentido, uma revisão na fórmula de cálculo desse indicador deve ser considerada para os próximos períodos visando aprimorar sua métrica.

Fórmula de cálculo: [Gastos totais/indicador 8]

8. Número de propostas realizadas nas instalações abertas

Pactuado: 722 propostas de pesquisas.

Realizado: 683 propostas de pesquisas.

Foram realizadas 683 propostas de pesquisas nas instalações abertas do LNLS, 5,7% a menos do pactuado. Essa variação deve-se à não conclusão do comissionamento de três linhas de luz por dificuldades técnicas imprevistas e a não operação da fonte de luz síncrotron durante alguns fins de semana, previstos no plano anual.

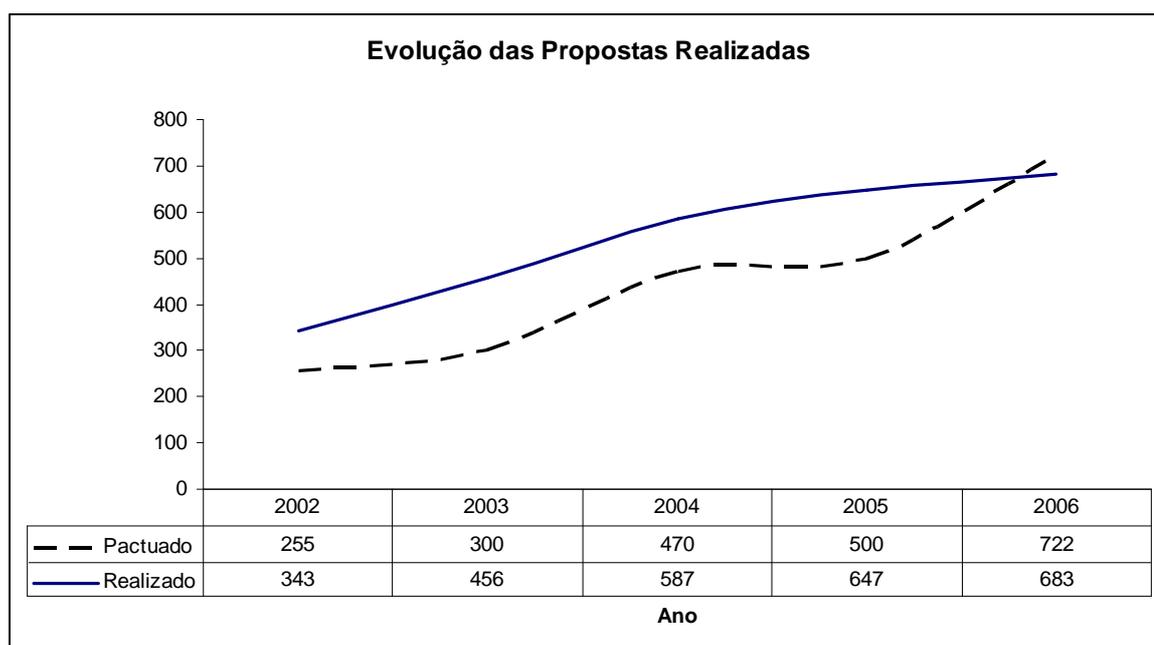


Figura 36: Evolução das propostas de pesquisas realizadas.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

A distribuição da realização das propostas nas instalações abertas no período foram: 434 propostas nas linhas de luz, 161 no Laboratório de Microscopia Eletrônica, 8 no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, 27 no Laboratório de Microfabricação, 16 no Laboratório de Microscopia de Força Atômica e Tunelamento e 37 no Laboratório de Espectrometria de Massas.

Fórmula: [Números de propostas realizadas]

9. Índice de satisfação dos usuários

Pactuado: 85%

Realizado: 93%

O indicador de satisfação dos usuários foi obtido a partir da pesquisa de opinião com os usuários durante a realização dos experimentos.

A pesquisa realizada contou com a participação de 127 propostas, dentre um total de 434 propostas realizadas nas linhas de luz, no período de janeiro a dezembro de 2006, tendo sido obtido o índice de 93% de satisfação dos usuários. Salientamos que a medida inclui apenas as linhas de luz e que elas já refletem a nova sistemática de coleta de dados, isto é, questionários conduzidos pelo Serviço de Apoio aos Usuários. O detalhamento dos resultados pode ser observado no gráfico a seguir:

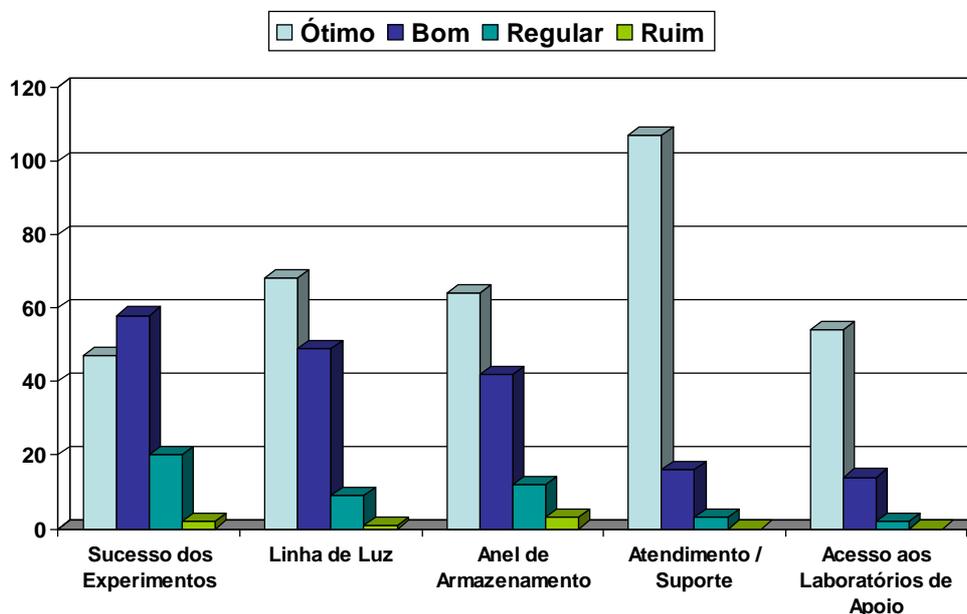


Figura 37: Resultado da Pesquisa de Satisfação dos Usuários.

Fórmula de cálculo: {[Qualidade da linha de luz Ótima e/ou Bom] + [Qualidade do anel de armazenamento Ótima e/ou Bom] + [Atendimento/suporte recebido Ótimo e/ou Bom]+[Acesso a laboratórios de preparação de amostras Ótimo e/ou Bom]} / [Total da pontuação possível]

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

10. Número total de publicações

Pactuado: 200 publicações em periódicos indexados

Realizado: 227 publicações em periódicos indexados

O banco de dados da produção bibliográfica do LNLS registrou um total de 227 artigos publicados em periódicos indexados pelo *Institute For Scientific Information/Thomson Scientific – ISI* durante o ano de 2006.

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

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

Pactuado: 12 artigos em periódicos indexados

Realizado: 13 artigos em periódicos indexados

Treze artigos dentre os 227 artigos publicados no ano de 2006 foram em periódicos indexados com fator de impacto superior a 5. Como parâmetro é utilizada 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

Pactuado: 2,5 artigos por pesquisador interno

Realizado: 3,5 artigos por pesquisador interno

Durante o ano de 2006 foram publicados 69 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

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

Realizado: 3,0 pós-graduandos sob orientação por pesquisador

Estiveram sob orientação dos pesquisadores do LNLS durante o ano de 2006, 58 alunos de pós-graduação, sendo 50 bolsistas de doutorado e 8 bolsistas 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-graduados orientados/total de pesquisadores ABTLuS]

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

14. Taxa de Supervisão de pós-doutores

Pactuado: 1,0 pós-doutor supervisionado

Realizado: 1,0 pós-doutor supervisionado

Estiveram sob supervisão, no período, 20 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 foram contratados 4 profissionais.

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

15. Números de Memorandos Técnicos disponíveis na *internet*

Pactuado: 10 memorandos técnicos

Realizado: 10 memorandos técnicos

Foram disponibilizados 10 memorandos técnicos *na Internet* e a meta foi atingida.

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

16. Número de projetos de desenvolvimento tecnológico

Pactuado: 7 projetos de desenvolvimento tecnológico

Realizado: 8 projetos de desenvolvimento tecnológico

As interações com o Setor Industrial no ano de 2006, referem-se à continuidade dos projetos de desenvolvimentos tecnológicos com as seguintes empresas: HP, GETEC, NOVOFILME e OXITENO. Novos parceiros foram incorporados em projetos de desenvolvimento tecnológico durante o ano: BOSCH-Brazil, CENPES-PETROBRÁS, D&L-Welding Fumes e PADTEC.

Interações foram iniciadas durante o ano de 2006 com o Genius Instituto e um projeto com o Hospital do Câncer de Campinas - Centro Boldrini, sendo que os planos de trabalho específicos estão em fase de discussão e submissão para levantamento de recursos financeiros para sua execução.

Fórmula de cálculo: [Total de projetos realizados]

17. Número de técnicos externos treinados

Pactuado: 25 técnicos treinados

Realizado: 32 técnicos treinados

No ano de 2006 foram treinados 32 técnicos para as atividades do LNLS.

Fórmula de cálculo: [Número de técnicos treinados]

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

18. Número de pesquisadores externos treinados

Pactuado: 270 pesquisadores treinados

Realizado: 202 pesquisadores treinados

Durante o ano de 2006 foram realizados 4 eventos de treinamento de usuários externos. Devido às restrições orçamentárias do período não foi possível atingir plenamente a meta.

Fórmula de cálculo: [Número de pesquisadores externos treinados]

19 – Horas de treinamento por funcionário

Pactuado: 20 horas por funcionário

Realizado: 43 horas por funcionário

Durante o ano de 2006 foram realizadas 9.320 horas de treinamento para uma força de trabalho de 219 pessoas.

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

20 – Alavancagem de recursos do Contrato de Gestão

Pactuado: 30% de alavancagem

Realizado: 87% de alavancagem.

O indicador de alavancagem de recursos no período foi de 87%, fato que demonstra a capacidade de captação de recursos do LNLS. No entanto, a superação da meta neste ano foi causada, principalmente, pelo aporte para a construção do prédio César Lattes e a instalação dos novos microscópios eletrônicos. No mais, a frustração das expectativas de recomposição orçamentária do Contrato de Gestão também impacta na elevação do indicador. Os níveis elevados de alavancagem podem vir a comprometer a operação regular das atividades caso não haja correspondente acréscimo no orçamento operacional do LNLS.

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

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

C. CONCLUSÃO

O primeiro fato marcante no ano de 2006 foi, sem dúvida, a renovação do Contrato de Gestão por um período de quatro anos, de 2006 até 2009. A renovação foi feita a partir do Plano Diretor ABTLuS 2006-2009. O orçamento proposto nesse Plano Diretor, no entanto, é significativamente superior ao previsto no Contrato. Com isto, o laboratório deve fazer uma reavaliação do seu planejamento para adequação de suas atividades aos valores estimados no Contrato e considerar a expansão dos recursos de outras fontes para complementar os recursos previstos. Estes dois caminhos não são excludentes e devem visar o melhor cumprimento da missão do laboratório.

Em 2006 uma nova linha entrou em operação, a segunda linha de SAXS, a qual era aguardada ansiosamente pelos usuários. Outras três linhas de luz foram concluídas e estão em fase final de comissionamento. Ainda na fonte de luz síncrotron, o ondulador construído no LNLS foi caracterizado e sua instalação teve início com a colocação da câmara de vácuo do ondulador no anel na parada de manutenção do final de ano. O *wiggler* para ciência dos materiais foi especificado e sua aquisição está em processo de negociações com os fornecedores.

Os novos microscópios eletrônicos foram adquiridos. O prédio de nanociências teve sua construção iniciada com previsão de conclusão no primeiro semestre de 2007, quando serão instalados os novos microscópios. Este prédio abre novas oportunidades para a expansão dos trabalhos em nanociências e nanotecnologia, possibilitando o espaço necessário para o desenvolvimento de novos laboratórios associados aos projetos de pesquisa e, em particular, em interação com a indústria.

Na biologia molecular estrutural, além do avanço na linha MX2, devemos salientar a aquisição de um sistema de *micro-array* e de dois robôs de cristalização de proteínas. Estes equipamentos permitirão uma maior capacidade na seleção de proteínas de interesse e no processo de obtenção de cristais de proteínas para resolução por cristalografia, um dos gargalos dos trabalhos em biologia estrutural.

A interação industrial continuou se intensificando, destacando-se o contrato com a PETROBRAS, com o LNLS compondo uma das redes para desenvolvimento tecnológico em catálise.

Todos estes investimentos prevêem um aumento significativo da interação com a comunidade científica e tecnológica em 2007, ampliando em quantidade e qualidade suas instalações nas áreas de foco do laboratório e de interesse da comunidade.

Em 2006, no entanto, a situação financeira foi delicada em função de dois fatores. Em primeiro lugar, o atraso na aprovação do orçamento da União fez com que os recursos a serem repassados para a ABTLuS através de Aditivos ao Contrato de Gestão só fossem confirmados em junho. Com isto, o laboratório só tomou conhecimento do seu orçamento após quase metade do ano ter sido cumprido e só pode manter sua operação com o uso das reservas financeiras. Em segundo lugar, os valores contratados nos Aditivos do ano de 2006 representaram um corte de 15%

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS

Relatório Anual de 2006

em relação aos valores previstos no Contrato de Gestão e definidos para o exercício de 2006 durante a elaboração do orçamento deste ano junto ao Ministério. Estes fatos levaram a ABTLuS a uma situação difícil, exigindo um forte contingenciamento de despesas a partir do mês de julho. Devido ao pouco tempo para se adequar à realidade orçamentária e ao significativo corte de recursos, o resultado foi um alto déficit contábil, levando a uma perda efetiva das reservas financeiras. Esta situação põe a Associação em estado de alerta, levando à decisão de operação sob restrição de despesas no início de 2007 até a definição orçamentária para o ano.

Uma reflexão mais profunda terá que ser feita em 2007. Nos últimos três anos o orçamento do laboratório manteve-se basicamente o mesmo em valores nominais. Considerando-se o contínuo aumento de instalações e também levando-se em conta a inflação existente no período, o laboratório perdeu sua capacidade de investimento e, em 2006, como mencionado, operou com déficit. Isto coloca em xeque a expansão do laboratório e a capacidade de utilizar plenamente o potencial de instrumentação científica desenvolvido ao longo dos anos. É necessária uma recomposição urgente do orçamento do laboratório, retomando pelo menos os valores previstos no Contrato de Gestão, sob o risco de ver sua capacidade de atendimento à comunidade científica e tecnológica estagnar-se, com clara perda dos recursos investidos e prejuízos para a ciência brasileira.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS Relatório Anual de 2006

APÊNDICES

Ord.	Pesquisadores	Observações
1	ANA CAROLINA DE MATTOS ZERI	
2	ANTONIO JOSE RAMIREZ LONDONO	
3	ANTONIO RUBENS BRITTO DE CASTRO	Associado/UNICAMP
4	ARNALDO NAVES DE BRITO	
5	BEATRIZ GOMES GUIMARÃES	
6	CARLOS HENRIQUE INÁCIO RAMOS	
7	CELSO EDUARDO BENEDETTI	
8	DANIEL MÁRIO UGARTE	Associado/UNICAMP
9	DANIELA ZANCHET	
10	EDUARDO GRANADO MONTEIRO DA SILVA	Associado/UNICAMP
11	FLÁVIO GARCIA	
12	FRANCISCO JAVIER MEDRANO MARTIN	
13	GILBERTO MEDEIROS RIBEIRO	
14	GUSTAVO DE MEDEIROS AZEVEDO	
15	HARRY WESTFAHL JUNIOR	
16	IGOR POLIKARPOV	Associado/USP-IFSC
17	JOAO ALEXANDRE RIBEIRO GONCALVES BARBOSA	
18	JORG KOBARG	
19	NILSON IVO TONIN ZANCHIN	
20	PEDRO FERNANDES TAVARES	
21	RICHARD LANDERS	Associado/UNICAMP
22	ROGERIO MAGALHÃES PANIAGO	Associado/UFMG
23	SERGIO TEIXEIRA RIBEIRO	Associado/UFRJ

Tabela 14: Pesquisadores da ABTLuS

Pós-doutores	Agência Financiadora
1 ALEXSANDRE FIGUEIREDO LAGO	FAPESP
2 ANGELO MALACHIAS DE SOUZA	FAPESP
3 CARLOS MARIO GARZON OSPINA	CNPq
4 CAROLINE RIBEIRO DE BORJA OLIVEIRA	CNPq
5 CEDRIC HESLING	CNPq
6 CRISTIANO LUIS PINTO DE OLIVEIRA	CNPq
7 DANIEL CARLOS BIGGEMANN TEJERO	ABTLuS
8 EDVALDO ALVES DE SOUZA JUNIOR	CNPq
9 ELIANA MARIA ASSMANN	FAPESP
10 ESTEBAN DAMIAN AVENDANO SOTO	CNPq
11 HERBERT WINNISCHOFER	FAPESP
12 LEANDRA WATANABE	FAPESP
13 LILIANE APARECIDA TEIXEIRA ARNALDI	CNPq
14 MANOEL GUSTAVO PETRUCCELLI HOMEM	FAPESP
15 MARCIA REGINA SOARES DA SILVA	FAPESP
16 MARCOS ANTONIO DE OLIVEIRA	FAPESP
17 MARCOS VICENTE DE ALBUQUERQUE SALLES NAVARRO	ABTLuS
18 MARIO SANCHES MATILDE JUNIOR	ABTLuS
19 PAULA SILVIA HADDAD FERREIRA	CNPq
20 SERGIO PILLING GUAPYASSU DE OLIVIERA	ABTLuS

Tabela 15: Pós-doutores supervisionados por pesquisadores da ABTLuS

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

ORD.	DOUTORANDOS	CURSO ATUAL (ESPEC/MESTR/DOU)	INSTITUIÇÃO	AGENCIA DE FOMENTO
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 / DD
4	AMADEU HOSHI IGLESIAS	QUIMICA	UNICAMP	FAPESP
5	AMANDA ABDALLA VALERIO	BIOFISICA	UNIP	FAPESP
6	ANA OLIVIA TIROLI	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	CNPq
7	ANTONIO AUGUSTO MALFATTI GASPERINI	FISICA	UFSC	CNPq
8	BEATRIZ SANTOS CAPELA ALVES	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
9	CAMILA RAMOS DOS SANTOS	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
10	CARLA AZIMONTE BOTTAN	FISICA	UNICAMP	FAPESP
11	CARLOS LUIS MAYORGA ESPINOZA	FISICA	UNIV.COSTA RICA	CLAF
12	CAROLINA SANTACRUZ PEREZ	BIOTECNOLOGIA	PONT. UNIV.JAVERIANA	CNPq
13	CEDRIC HESLING	BIOLOGIA MOLECULAR	DEUG - FRANÇA	CNPq
14	DANIEL CARLOS FERREIRA LANZA	BIOQUIMICA	UNIV FEDERAL VIÇOSA	FAPESP
15	DANIEL HENRIQUE DO AMARAL CORREA	BIOQUIMICA	UNIARARAS	FAPESP
16	DANIEL MARAGNO TRINDADE	BIOLOGIA MOLECULAR	UNESP	FAPESP
17	DARIO OLIVEIRA DOS PASSOS	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
18	DENISE BASSO NAKABAYASHI	FISICA	UNICAMP	FAPESP
19	FABIO CUPRI RINALDI	FISICA	UNICAMP	FAPESP
20	FELIX GUILHERMO GONZALEZ HERNANDEZ	FISICA	UCR - COSTA RICA	FAPESP
21	FLAVIA RAQUEL GONÇALVES CARNEIRO	BIOLOGIA	UERJ	FAPESP
22	GUSTAVO COSTA BRESSAN	BIOLOGIA FUNC.MOLECU	UFG	FAPESP
23	JULIANA FERREIRA DE OLIVEIRA	QUIMICA	UNICAMP	FAPESP
24	JULIANA HELENA COSTA SMETANA	BIOLOGIA	UNICAMP	CNPq
25	KAREN FULAN DISCOLA	BIOQUIMICA	UNICAMP	FAPESP
26	KELLY SANTOS	BIOLOGIA	UFSC	FAPESP
27	LETICIA GONÇALVES NUNES COELHO	FISICA	UFMG	CNPq
28	LETICIA KHATER	BIOQUIMICA	UNICAMP	FAPESP
29	LILIANE APARECIDA TEIXEIRA ARNALDI	BIOLOGIA	USF	PCI
30	MARCEL NAKAHIRA	FISICA	UNESP	CAPES - UNICAMP
31	MARCELA HERNANDEZ JIMENEZ	FISICA	UCR - COSTA RICA	FAPESP
32	MARINA MARQUES TEIXEIRA VANINI	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
33	MARINA SOARES LEITE	FISICA	UFPE	FAPESP
34	MAURA HEBLING JORDAO	ENHENHARIA QUIMICA	UN ESTADUAL MARINGA	CNPq / PCI
35	MAYA PAOLA CERRO VERGARA	FISICA	UNIANDES	CNPQ
36	NARCIZO MARQUES DE SOUZA NETO	FISICA	UFPB	CNPQ
37	NATALIA PRADO DE ABREU	FISICA	UNICAMP	FAPESP
38	ODALYS GARCIA CABRERA	BIOLOGIA FUNCIONAL E	UNICAMP	CAPES/UNICAMP
39	PABLO ROBERTO FERNANDEZ SILES	FISICA	UNICAMP	CNPq
40	PATRICIA PEREIRA COLTRI	BIOLOGIA MOLECULAR	UNICAMP	FAPESP
41	PRISCILA OLIVEIRA DE GIUSEPPE	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
42	RAFAEL MONTEIRO FERNANDES	FISICA	UNICAMP	CNPq
43	RAUL ANDRES CERNADAS	BIOTECNOLOGIA	Univ.Santa Fé	FAPESP
44	ROSICLER LAZARO BARBOSA	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP / DD
45	SANDRA MARA NARESSI SCAPIN	BIOLOGIA	UNICAMP	FAPESP
46	TATIANA DE ARRUDA CAMPOS BRASIL DE SOUZA	BIOLOGIA	UNIV EST LONDRINA	FAPESP
47	THAIS HALINE VAZ	BIOQUIMICA	UNICAMP	CNPq
48	THIAGO CARLOS CAGLIARI	CIENCIAS BIOLOGICAS	UNICAMP	FAPESP
49	THIAGO PEDRO MAYER ALEGRE	FISICA	UNICAMP	FAPESP
50	TULIO COSTA RIZUTTI DA ROCHA	FISICA	UNICAMP	FAPESP/ DD

Tabela 16: Estudantes de doutorado orientados por pesquisadores da ABTLuS

Ord.	Mestrandos	CURSO ATUAL (ESPEC/MESTR/DOU)	INSTITUIÇÃO DO CURSO ATUAL	AGENCIA DE FOMENTO
1		8		
2	JOSE JADSON SAMPAIO DE FIGUEIREDO	ENG MECANICA	UNICAMP	CNPq
3	JULIO CESAR DA SILVA	FISICA	UNICAMP	CAPES
4	LUIZ HENRIQUE GALVÃO TIZEI	FISICA	UNICAMP	CNPq
5	MARCIO MEDEIROS SOARES	FISICA	UNICAMP	FAPESP
6	MAUREEN JOEL LAGOS PAREDES	FISICA	UNESP	FAPESP
7	PABLO ROBERTO FERNANDEZ SILES	FISICA	UNICAMP	CNPq
8	RAFAEL MOLENA SERAPHIM	ENG DE MATERIAIS	UNICAMP	CNPq

Tabela 17: Estudantes de mestrado orientados por pesquisadores da ABTLuS

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

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

¹ *Interaction of the hepatitis B virus protein HBx with the human transcription regulatory protein p120E4F in vitro* 1765

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

Virus Research, 115: 31-42 (2006)

² *X-ray powder diffraction beamline at D10B of LNLS: application to the Ba₂FeReO₆ double perovskite* 1773

Ferreira, F. F., Granado, E., Carvalho Jr., W., Kycia, S. W., Bruno, D., Droppa Jr., R.

Journal of Synchrotron Radiation, 13: 46-53 (2006)

³ *Evidence for the interaction of the regulatory protein Ki-1/57 with p53 and its interacting proteins* 1797

Nery, F. C., Rui, E., Kuniyoshi, H., Kobarg, J.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 341: 847-55 (2006)

⁴ *Barrier-induced carrier localization effects in ordered/disordered/ordered quaternary quantum wells grown on GaAs substrates* 1808

Ribeiro, E., Bernussi, A. A., Maltez, R. L., Carvalho Jr., W., Gobbi, A. L., Ugarte, D.

Physical Review B, 73: 075330-1-7 (2006)

⁵ *Spectroscopic characterization of the tumor antigen NY-REN-21 and identification of heterodimer formation with SCAND1* 1816

Carneiro, F. R. G., Silva, T. C. L., Alves, A. C., Haline-Vaz, T., Gozzo, F. C., Zanchin, N. I. T.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 343: 260-8 (2006)

⁶ *X-ray diffraction mapping of strain fields and chemical composition of SiGe:Si(001) quantum dot molecules* 1818

Leite, M. S., Gray, J. L., Hull, R., Floro, J. A., Paniago, R.M., Medeiros-Ribeiro, G.

Physical Review B, 73: 121308-1-4 (2006)

⁷ *The crystal structure of the small GTPase Rab11b reveals critical differences relative to the Rab11a isoform* 1841

Scapin, S. M. N., Carneiro, F. R. G., Alves, A. C., Javier Medrano, F., Guimarães, B. G., Zanchin, N. I. T.

Journal of Structural Biology, 154: 260-8 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

⁸ *Low resolution structure on the human alpha4 protein (IgBP1) and studies on the stability of alpha4 and of its yeast ortholog Tap42* 1842

Smetana, J. H. C., Oliveira, C. L. P., Jablonka, W., Pertinhez, T. A., Carneiro, F. R. G., Montero-Lomeli, M., Torriani, I., Zanchin, N. I. T.

Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics, 1764: 724-34 (2006)

⁹ *Identification and characterization of a proteolysis-resistant fragment containing in the Arabidopsis thaliana INT6/eIF3e translation factor* 1844

Murai, M. J., Carneiro, F. R. G., Gozzo, F. C., Ierardi, M. C. F., Pertinhez, T. A., Zanchin, N. I. T.

Cell Biochemistry and Biophysics, 44: 522-9 (2006)

¹⁰ *Low resolution structure and stability studies of human GrpE#2, a mitochondrial nucleotide exchange factor* 1846

Oliveira, C. L. P., Borges, J. C., Torriani, I., Ramos, C. H. I.

Archives of Biochemistry and Biophysics, 449: 77-86 (2006)

¹¹ *CGI-55 interacts with nuclear proteins and co-localizes to p80-coilin positive-coiled bodies in the nucleus* 1850

Lemos, T. A., Kobarg, J.

Cell Biochemistry and Biophysics, 44: 463-74 (2006)

¹² *A spectroscopic analysis of the interaction between the human regulatory proteins RACK1 and Ki-1/57* 1852

Nery, F. C., Bressan, G. C., Alborghetti, M. R., Passos, D. O., Kuniyoshi, T. M., Ramos, C. H. I., Oyama, S.T., Kobarg, J.

Biological Chemistry, 387: 577-82 (2006)

¹³ *The methylation of the C-terminal region of hnRNPQ (NSAP1) is important for its nuclear localization* 1876

Passos, D. O., Quaresma, A. J. C., Kobarg, J.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 346: 517-25 (2006)

¹⁴ *Low-cost nanomanipulator for in situ experiments in a SEM* 1877

Nakabayashi, D., Silva, P. C., Gonzalez, J. C., Rodrigues, V., Ugarte, D.

Microscopy and Microanalysis, 12: 311-6 (2006)

¹⁵ *Improving the ductility-dip cracking resistance of Ni-base alloys* 1923

Ramirez, A. J., Sowards, J. W., Lippold, J. C.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Journal of Materials Processing Technology, 179: 212-8 (2006)

¹⁶ *Spectroscopic and thermodynamic measurements of nucleotide-induced changes in the human 70-kDa heat shock cognate protein* 1935

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

Archives of Biochemistry and Biophysics, 452: 46-54 (2006)

¹⁷ *Characterization of the human ortholog of Mov34 reveals eight N-terminal residues important for MPN domain stability* 1971

Alves, B. S. C., Oyama, S.T., Gozzo, F. C., Sanches, M., Guimarães, B. G., Zanchin, N. I. T.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 347: 608-15 (2006)

¹⁸ *The acidic domain of hnRNPQ (NSAP1) has structural similarity to barstar and binds to Apobec1* 1975

Quaresma, A. J. C., Oyama, S.T., Barbosa, J. A. R. G., Kobarg, J.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 350: 288-97 (2006)

¹⁹ *Letter to the editor: NMR assignment of the outer membrane lipoprotein (OmlA) from Xanthomonas axonopodis pv citri* 2027

Vanini, M. M. T., Benedetti, C. E., Spisni, A., Pertinhez, T. A.

Journal of Biomolecular NMR, 36: 34 (2006)

²⁰ *Experimental realization of suspended atomic chains composed of different atomic species* 2056

Bettini, J., Sato, F., Coura, P. Z., Dantas, S. O., Galvao, D. S., Ugarte, D.

Nature Nanotechnology, 1: 182-5 (2006)

²¹ *Longitudinal dynamics with rf phase modulation in the brazilian electron storage ring* 2058

Abreu, N. P., Farias, R. H. A., Tavares, P. F.

Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams, 9: 124401-1-16 (2006)

²² *Landé g tensor in semiconductor nanostructures* 2069

Alegre, T. P. M., Hernández, F. G. G., Pereira, A. L. C., Medeiros-Ribeiro, G.

Physical Review Letters, 97: 236402-1-4 (2006)

²³ *Corrosion protection of fluorzirconate glasses coated by a layer of surface modified tin oxide nanoparticles* 1809

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Hammer, P., Rizzato, A. P., Alvarez, F., Landers, R., Pulcinelli, S. H., Santilli, C. V.

Thin Solid Films, 502: 94-8 (2006)

²⁴ *Evaluation of copper oxide thin films as electrodes for microbatteries* 1811

Souza, E. A., Landers, R., Cardoso, L. P., Cruz, T.G.S., Tabacniks, M. H., Gorenstein, A.

Journal of Power Sources, 155: 358-63 (2006)

²⁵ *Molecular dynamics simulations of ligand dissociation from thyroid hormone receptors: evidence of the likeliest escape pathway and its implications for the design of novel ligands* 1814

Martinez, L., Webb, P., Polikarpov, I., Skaf, M. S.

Journal of Medicinal Chemistry, 49: 23-6 (2006)

²⁶ *Structural and electrochemical behavior of tungsten oxide obtained by solid state reaction* 1817

Souza, E. A., Santos, A. O. dos, Landers, R., Cunha, F., Macedo, M. A.

Solid State Ionics, 177: 697-701 (2006)

²⁷ *Anomalous phonon shifts in the paramagnetic phase of multiferroic RMn_2O_5 ($R=Bi, Eu, Dy$): possible manifestations of unconventional magnetic correlations* 1821

Garcia-Flores, A. F., Granado, E., Martinho, H., Urbano, R. R., Rettori, C., Oseroff, S. B.

Physical Review B, 73: 104411-1-6 (2006)

²⁸ *Structural analysis of an Echinococcus granulosus actin-fragmenting protein by small-angle X-ray scattering studies and molecular modeling* 1830

Grimm, E. D., Portugal, R. V., Oliveira Neto, M., Martins, N. H., Polikarpov, I., Zaha, A., Ferreira, H. B.

Biophysical Journal, 90: 3216-23 (2006)

²⁹ *Evolution of the magnetic properties and magnetic structures along the $RmMIn_{3m+2}$ ($R=Ce, Nd, Gd, Tb$; $M=Rh, Ir$; and $m=1, 2$) series of intermetallic compounds* 1856

Pagliuso, P. G., Garcia, D. J., Miranda, E., Granado, E., Lora-Serrano, R., Giles, C., Duque, J. G. L., Urbano, R. R., Rettori, C., Thompson, J. D., Hundley, M. F., Sarrao, J. L.

Journal of Applied Physics, 99: 08P703-1-3 (2006)

³⁰ *General equation for the determination of the crystallite size L_a of nanographite by Raman spectroscopy* 1857

Cançado, L. G., Takai, K., Enoki, T., Jorio, A., Coelho, L. N., Paniago, R.M., Pimenta, M. A.

Applied Physics Letters, 88: 163106-1-3 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

³¹ *Synthesis of silica nanowires by active oxidation of silicon substrates* ¹⁸⁵⁹

Ferlauto, A. S., Oliveira, S., Silva, E. E., Paniago, R.M., Ladeira, L. O., Lacerda, R. G.

Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 6: 791-5 (2006)

³² *Threshold photoelectron spectroscopy of zone* ¹⁸⁷⁴

Couto, H., Mocellin, A., Moreira, C. D., Gomes, M. P., Brito, A. N. de , Lopes, M. C. A.

Journal of Chemical Physics, 124: 204311-1-6 (2006)

³³ *Crystallization and preliminary X-ray diffraction studies of ferredoxin reductase from* ¹⁸⁸⁰
Leptospira interrogans

Nascimento, A. S., Ferrarezi, T., Catalano-Dupuy, D. L., Ceccarelli, E. A., Polikarpov, I.

Acta Crystallographica F, 62: 662-4 (2006)

³⁴ *A new member of the aldo-keto reductase family from the plant pathogen Xylella* ¹⁸⁸⁴
fastidiosa

Rosselli, L. K., Oliveira, C. L. P., Azzoni, A. R., Tada, S. F. S., Catani, C. F., Saraiva, A. M., Soares, J. S. M., Medrano, F. J., Torriani, I., Souza, A. P.

Archives of Biochemistry and Biophysics, 453: 143-50 (2006)

³⁵ *Human thyroid receptor forms tetramers in solution, which dissociate into dimers upon* ¹⁸⁸⁵
ligand binding

Figueira, A. C. M., Dias, S. M. G., Santos, M. A. M., Apriletti, J. W., Baxter, J. D., Webb, P., Neves, F. A. R., Simeoni, L. A., Ribeiro, R. C. J., Polikarpov, I.

Cell Biochemistry and Biophysics, 44: 453-62 (2006)

³⁶ *Structurally tuned magnetic properties of $TbmRhnIn3m+2n$ ($m = 1, 2$; $n = 0,1$)* ¹⁹⁴⁹
intermetallic antiferromagnets

Lora-Serrano, R., Mendonça-Ferreira, L., Garcia, D. J., Miranda, E., Giles, C., Duque, J. G. S., Granado, E., Pagliuso, P. G.

Physica B - Condensed Matter, 384: 326-8 (2006)

³⁷ *Spectroscopic characterization of polyaniline formed in the presence of montmorillonite* ¹⁹⁶¹
clay

Nascimento, G. M. do, Constantino, V. R. L., Landers, R., Temperini, M. L. A.

Polymer, 47: 6131-9 (2006)

³⁸ *Antiferromagnetic ordering of divalent Eu in $Eu3Ir4Sn13$ intermetallic compound* ¹⁹⁷²

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Mendonça-Ferreira, L., Bittar, E. M., Pires, M. A., Urbano, R. R., Agüero, O. E., Torriani, I., Rettori, C., Pagliuso, P. G., Malachias, A., Granado, E., Caytuero, A., Baggio-Saitovich, E.

Physica B - Condensed Matter, 384: 332-5 (2006)

³⁹ *Structural rearrangements in the thyroid hormone receptor hinge domain and their putative role in the receptor function* 1986

Nascimento, A. S., Dias, S. M. G., Aparicio, R., Nunes, F. M., Ambrosio, A. L. B., Bleicher, L., Figueira, A. C. M., Santos, M. A. M., Oliveira Neto, M., Fischer, H., Togashi, M., Craievich, A. F., Garratt, R. C., Baxter, J. D., Webb, P., Polikarpov, I.

Journal of Molecular Biology, 360: 586-98 (2006)

⁴⁰ *Hafnium silicide formation on Si(100) upon annealing* ²⁰³⁶

Siervo, A. de, Flüchter, C. R., Weier, D., Schürmann, M., Dreiner, S., Westphal, C., Carazzole, M. F., Pancotti, A., Landers, R., Kleiman, G. G.

Physical Review B, 74: 075319-1-10 (2006)

⁴¹ *Magnetic structure and critical behavior of GdRhIn5: resonant X-ray diffraction and renormalization group analysis* 2050

Granado, E., Uchoa, B., Malachias, A., Lora-Serrano, R., Pagliuso, P. G., Westfahl Jr., H.

Physical Review B, 74: 214428-1-9 (2006)

⁴² *Magnetic structure and enhanced T_n of the rare-earth intermetallic compound TbRhIn5: experiments and mean-field model* ²⁰⁵¹

Lora-Serrano, R., Giles, C., Granado, E., Garcia, D. J., Miranda, E., Agüero, O. E., Mendonça-Ferreira, L., Duque, J. G. S., Pagliuso, P. G.

Physical Review B, 74: 214404-1-8 (2006)

⁴³ *Cation distribution in copper ferrite nanoparticles of ferrofluids: a synchrotron XRD and EXAFS investigation* 1794

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

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 300: e213-6 (2006)

⁴⁴ *FEZ1 dimerization and interaction with transcription regulatory proteins involves its coiled-coil region* 1799

Assmann, E. M., Alborghetti, M. R., Camargo, M. E. R., Kobarg, J.

Journal of Biological Chemistry, 281: 9869-81 (2006)

⁴⁵ *ESR study of the EU2+ g-value in the metallic phase of cubic hexaboride Ca1-xEuxB6(0.15 < x <= 1.00)* 1802

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Urbano, R. R., Pagliuso, P. G., Rettori, C., Malachias, A., Granado, E., Schlottmann, P., Fisk, Z., Oseroff, S. B.

Physical Review B, 73: 115123-1-6 (2006)

⁴⁶ *Solution conformation and heparin-induced dimerization of the full-length extracellular domain of the human amyloid precursor protein* 1805

Gralle, M., Oliveira, C. L. P., Guerreiro, L. H., McKinstry, W. J., Galatis, D., Masters, C. L., Cappai, R., Parker, M. W., Ramos, C. H. I., Torriani, I., Ferreira, S. T.

Journal of Molecular Biology, 357: 493-508 (2006)

⁴⁷ *The putative telomerase reverse transcriptase component of Leishmania amazonensis: gene cloning and characterization* 1806

Giardini, M. A., Lira, C. B. B., Conte, F. F., Camillo, L. R., Siqueira Neto, J. L. de, Ramos, C. H. I., Cano, M. I. N.

Parasitology Research, 98: 447-54 (2006)

⁴⁸ *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of XAC1151, a small heat-shock protein from Xanthomonas axonopodis pv. citri belonging to the a-crystallin family* 1823

Hilario, E., Teixeira, E. C., Pedroso, G. A., Bertolini, M. C., Medrano, F. J.

Acta Crystallographica F, 62: 446-8 (2006)

⁴⁹ *Secondary ion emission from condensed CO bombarded by fission fragments* 1828

Farenzena, L. S., Martinez, R., Iza, P., Ponciano, C. R., Homem, M. G. P., Brito, A. N. de, da Silveira, E. F., Wien, K.

International Journal of Mass Spectrometry, 251: 1-9 (2006)

⁵⁰ *Gas phase photoabsorption and mass spectra of L-alanine and L-proline in the soft X-ray region* 1848

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

Chemical Physics, 324: 420-4 (2006)

⁵¹ *Ion cluster desorption from frozen NH₃ induced by impact of fast multi-charge ions* 1849

Martinez, R., Ponciano, C. R., Farenzena, L. S., Iza, P., Homem, M. G. P., Brito, A. N. de, Wien, K., da Silveira, E. F.

International Journal of Mass Spectrometry, 253: 112-21 (2006)

⁵² *Effects of dipolar interactions on the magnetic properties of alpha-Fe₂O₃ nanoparticles in the blocked state* 1860

Nunes, W. C., Cebollada, F., Knobel, M., Zanchet, D.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Journal of Applied Physics, 99: 08N705-1-3 (2006)

⁵³ *Purification and characterization of a novel pectinase from *Acrophialophora nainiana* with emphasis on its physicochemical properties* 1862

Freitas, S. M., Medrano, F. J.

Journal of Biotechnology, 123: 33-42 (2006)

⁵⁴ *Structural insights into enzyme-substrate interaction and characterization of enzymatic intermediates of organic hydroperoxide resistance protein from *Xylella fastidiosa** 1863

Oliveira, M. A., Guimarães, B. G., Cussiol, J. R. R., Medrano, F. J., Gozzo, F. C., Netto, L. E. S.

Journal of Molecular Biology, 359: 433-45 (2006)

⁵⁵ *Structure of chorismate synthase from *Mycobacterium tuberculosis** 1864

Dias, M. V. B., Borges, J. C., Ely, F., Pereira, J. H., Canduri, F., Ramos, C. H. I., Frazzon, J., Palma, M.S., Basso, L. A., Santos, D. S., Azevedo Jr., W. F. de

Journal of Structural Biology, 154: 130-43 (2006)

⁵⁶ *Growth kinetics of secondary austenite in the welding microstructure of a UNS S32304 duplex stainless steel* 1886

Garzón, C. M., Ramirez, A. J.

Acta Materialia, 54: 3321-31 (2006)

⁵⁷ *Atomic-scale structure of irradiated GaN compared to amorphised GaP and GaAs* 1913

Ridgway, M. C., Everett, S. E., Glover, C. J., Kluth, S. M., Kluth, P., Johannessen, B., Hussain, Z. S., Llewellyn, D. J., Foran, G. J., Azevedo, G. de M.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 250: 287-90 (2006)

⁵⁸ *Electronic sputtering produced by fission fragments on condensed CO and CO₂* 1941

Ponciano, C. R., Martinez, R., Farenzena, L. S., Iza, P., Silveira, E. F. da, Homem, M. G. P., Brito, A. N. de, Wien, K.

Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 17: 1120-8 (2006)

⁵⁹ *Local and global magnetic properties of Zn_{1-x}CoxO and Mn-doped GaAs thin films* 1999

Iwamoto, W., Urbano, R. R., Pagliuso, P. G., Rettori, C., Samanta, K., Bhattacharya, P., Katiyar, R. S., da Silva, J. H. D., Pereira, A., Azevedo, G. de M., Oseroff, S. B.

IEEE Transactions on Magnetics, 42: 2700-2 (2006)

⁶⁰ *In situ sytem for X-ray absorption spectroscopy experiments to investigate nanoparticle crystallization* 2004

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Meneses, C. T., Flores, W. H., Sotero, A. P., Tamura, E., Garcia, F., Sasaki, J. M.

Journal of Synchrotron Radiation, 13: 468-70 (2006)

⁶¹ *The molybdate-binding protein (ModA) of the plant pathogen Xanthomonas axonopodis pv. citri* 2026

Balan, A., Santacruz, C. P., Moutran, A., Ferreira, R. C. C., Medrano, F. J., Perez, C. A., Ramos, C. H. I.,
Ferreira, L. C. de S.

Protein Expression & Purification, 50: 215-22 (2006)

⁶² *Letter to the editor: 1H, 15N and 13C resonance assignments of cerato-platanin, a phytotoxic protein from Ceratocystis fimbriata* 2028

Oliveira, A. L., Pazzagli, L., Pantera, B., Cappugi, G., Benedetti, C. E., Spisni, A., Pertinhez, T. A.

Journal of Biomolecular NMR, 36: 50 (2006)

⁶³ *The HD-GYP domain of RpfG mediates a direct linkage between the Rpf quorum-sensing pathway and a subset of diguanylate cyclase proteins in the phytopathogen Xanthomonas axonopodis pv citri* 2030

Andrade, M. O., Alegria, M. C., Guzzo, C. R., Docena, C., Rosa, M. C. P., Ramos, C. H. I., Farah, C. S.

Molecular Microbiology, 62: 537-51 (2006)

⁶⁴ *Molecular dynamics and circular dichroism studies of human and rat C-peptides* 2031

Mares-Guia, T. R., Maigret, B., Maia Neto, P. A., Vilela, L., Ramos, C. H. I., Juliano Neto, L., Juliano, M. A., Mares-Guia, M. L., Santoro, M. M.

Journal of Molecular Graphics and Modeling, 25: 532-42 (2006)

⁶⁵ *Phosphate closes the solution structure of the 5-enolpyruvylshikimate-3-phosphate synthase (EPSPS) from Mycobacterium tuberculosis* 2032

Borges, J. C., Pereira, J. H., Vasconcelos, I. B., Santos, G. C. dos, Olivieri, J. R., Ramos, C. H. I., Palma, M.S., Basso, L. A., Santos, D. S., Azevedo Jr., W. F. de

Archives of Biochemistry and Biophysics, 452: 156-64 (2006)

⁶⁶ *Magnetic reconfiguration of MnGaAS(001) observed by magnetic force microscopy and resonant soft X-ray scattering* 2042

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

Journal of Applied Physics, 100: 183906-1-7 (2006)

⁶⁷ *Transverse magnetic anisotropy of magnetoelastic origin induced in Co nanowires* 2043

Silva, E. L., Nunes, W. C., Knobel, M., Denardin, J. C., Zanchet, D., Pirota, K. R., Navas, D., Vásquez, C.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Physica B - Condensed Matter, 384: 22-4 (2006)

⁶⁸ *Surface composition and structure of palladium ultra-thin films deposited on Ni(111)* ¹⁸³⁸

Carazzole, M. F., Maluf, S. S., Siervo, A. de, Nascente, P. A. P., Landers, R., Kleiman, G. G.

Surface Science, 600: 2268-74 (2006)

⁶⁹ *Preferential amorphisation of Ge nanocrystals in a silica matrix* ²⁰⁰⁰

Ridgway, M. C., Azevedo, G. de M., Elliman, R. G., Wesch, W., Glover, C. J., Miller, R., Llewellyn, D. J., Foran, G. J., Hansen, J. L., Nylandstead-Larsen, A.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 242: 121-4 (2006)

⁷⁰ *Vibrational properties of Ge nanocrystals determined by EXAFS* ²⁰⁰¹

Araujo, L. L., Kluth, P., Azevedo, G. de M., Ridgway, M. C.

Physical Review B, 74: 184102-1-8 (2006)

⁷¹ *Reply to comment on "Photoionization of helium atoms irradiated with intense vacuum ultraviolet free-electron laser light. Part I. Experimental study of multiphoton and single-photon processes"* ²⁰⁵⁹

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

Physical Review A, 74: 027401-1-2 (2006)

⁷² *Copper-vanadium mixed oxide thin film electrodes* ²⁰⁶²

Souza, E. A., Santos, A. O. dos, Cardoso, L. P., Tabacniks, M. H., Landers, R., Gorenstein, A.

Journal of Power Sources, 162: 679-84 (2007)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

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

¹ *The phase-derivative method in EXAFS applied to the study of rare earth nickel perovskites* 1833

Piamonteze, C., Tolentino, H. C. N., Ramos, A. Y.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 246: 151-7 (2006)

² *The structural molecular biology network of the state of São Paulo, Brazil* 1851

Barbosa, J. A. R. G., Soares Netto, L. E., Farah, C. S., Schenkman, S., Meneghini, R.

Anais da Academia Brasileira de Ciências, 78: 241-53 (2006)

³ *Interaction of local anesthetics with a peptide encompassing the IV/S4-S5 linker of the Na⁺ channel* 1914

Fraceto, L. F., Oyama, S.T., Nakaie, C. R., Spisni, A., Paula, E., Pertinhez, T. A.

Biophysical Chemistry, 123: 29-39 (2006)

⁴ *Ki-1/57 interacts with PRMT1 and is a substrate for arginine methylation* 1974

Passos, D. O., Bressan, G. C., Nery, F. C., Kobarg, C. B.

The FEBS Journal, 273: 3946-61 (2006)

⁵ *Depth-dependent chemical and magnetic local orders in thin magnetic films* 1980

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

Applied Physics Letters, 89: 111910-1-3 (2006)

⁶ *Ionisation and dissociation of cometary gaseous organic molecules by solar wind particles - I: Formic acid* 2047

Pilling, S., Santos, A. C. F., Sant'Anna, M. M., Wolff, W., Barros, A. L. F., Souza, G. G. B. de, Faria, N. V. de C., Boechat-Roberty, H. M.

Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 372: 1379-88 (2006)

⁷ *Expression, crystallization and preliminary crystallographic analysis of SufE (XAC2355) from Xanthomonas axonopodis pv. citri* 1792

Guzzo, C. R., Silva, L. R., Galvão-Botton, L. M. P., Barbosa, J. A. R. G., Farah, C. S.

Acta Crystallographica F, 62: 268-70 (2006)

⁸ *Crystal structure and physical properties of Gd₃Co₄Sn₁₃ intermetallic antiferromagnet* 1855

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Pires, M. A., Mendonça-Ferreira, L., Duque, J. G. L., Urbano, R. R., Agüero, O. E., Torriani, I., Rettori, C., Bittar, E. M., Pagliuso, P. G.

Journal of Applied Physics, 99: 08J311-1-3 (2006)

⁹ *Nanostructure and giant hall effect in $TM_x(SiO_2)_{1-x}$ ($TM=Co, Fe, Ni$) granular system* 1858

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

Journal of Applied Physics, 99: 08C511-1-3 (2006)

¹⁰ *The Pyrococcus exosome complex structural and functional characterization* 1865

Ramos, C. R. R., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Oliveira, C. C.

Journal of Biological Chemistry, 281: 6751-9 (2006)

¹¹ *Role of oxygen vacancies in the magnetic and dielectric properties of the high-dielectric-constant system $CaCu_3Ti_4O_{12}$: an electron-spin resonance study* 1883

Pires, M. A., Israel, C., Iwamoto, W., Urbano, R. R., Torriani, I., Rettori, C., Pagliuso, P. G., Walmsley, L., Le, Z., Cohn, J. L., Oseroff, S. B.

Physical Review B, 73: 224404-1-7 (2006)

¹² *Structural insights into the interaction between prion protein and nucleic acid* 1920

Lima, L. M. T. R., Cordeiro, Y., Tinoco, L. W., Marques, A. F., Oliveira, C. L. P., Sampath, S., Kodali, R., Choi, G., Foguel, D., Foguel, D., Torriani, I., Caughey, B., Silva, J. L.

Biochemistry, 45: 9180-7 (2006)

¹³ *Synthesis and characterization of $Pt(0)$ nanoparticles in imidazolium ionic liquids* 1948

Scheeren, C. W., Machado, G., Teixeira, S. R., Morais, J. de, Domingos, J. B., Dupont, J.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 13011-20 (2006)

¹⁴ *Structural properties of the quaternary Heusler compound $Co_2Cr_{1-x}Fe_xAl$* 1977

Wurmehl, S., Morais, J., Alves, M. C. M., Teixeira, S. R., Fecher, G. H., Felser, C.

Journal of Alloys and Compounds, 423: 159-62 (2006)

¹⁵ *Growth of SnO nanobelts and dendrites by a self-catalytic VLS process* 1800

Orlandi, M. O., Leite, E. R., Aguiar, R., Bettini, J., Longo, E.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 6621-5 (2006)

¹⁶ *Multivariate calibrations for the SR-TXRF determination of trace concentrations of lead and arsenic in the presence of bromine* 1803

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Nagata, N., Peralta-Zamora, P. G., Poppi, R. J., Perez, C. A., Bueno, M. I. M. S.

X-Ray Spectrometry, 35: 79-84 (2006)

- 17 *Crystallization, data collection and phasing of the molybdate-binding protein of the phytopathogen Xanthomonas axonopodis pv. citri* 1810

Santacruz, C. P., Balan, A., Ferreira, L. C. de S., Barbosa, J. A. R. G.

Acta Crystallographica F, 62: 289-91 (2006)

- 18 *Investigations of intrinsic strain and structural ordering in a-Si:H using synchrotron radiation diffraction* 1813

Härting, M., Britton, D. T., Minani, E., Ntsoane, T. P., Topic, M., Thovhogi, T., Osiele, O. M., Knoesen, D., Harindintwari, S., Furlan, F., Giles, C.

Thin Solid Films, 501: 75-8 (2006)

- 19 *Local structure reconstruction in hydrogenated amorphous silicon from angular correlation and synchrotron diffraction studies* 1819

Britton, D. T., Minani, E., Knoesen, D., Schut, H., Eijit, S. W. H., Furlan, F., Giles, C., Härting, M.

Applied Surface Science, 252: 3194-200 (2006)

- 20 *Lytic activity and structural differences of amphipathic peptides derived from trialsyn* 1832

Martins, R. M., Sforça, M. L., Amino, R., Juliano, M. A., Oyama, S.T., Juliano Neto, L., Pertinhez, T. A., Spisni, A., Schenkman, S.

Biochemistry, 45: 1765-74 (2006)

- 21 *Tetramerization of the LexA repressor in solution: implications for gene regulation of the E. coli SOS system at acidic pH* 1847

Sousa, F. J. R., Lima, L. M. T. R., Pacheco, A. B. F., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Almeida, D. F., Foguel, D., Silva, J. L., Mohana-Borges, R.

Journal of Molecular Biology, 359: 1059-74 (2006)

- 22 *Combined investigations of fluid inclusions in opaque ore minerals by NIR/SWIR microscopy and microthermometry and synchrotron radiation X-ray fluorescence* 1861

Javier Rios, F., Alves, J. V., Perez, C. A., Costa, E. C., Rosière, C. A., Fuzikawa, K., Neves, J. M. C., Chaves, A. de O., Prates, S. P., de Barrio, R. E.

Applied Geochemistry, 21: 813-9 (2006)

- 23 *Alternate monatomic layer sputter deposition of FCT(L10-type) ordered FePt and CoPt films* 1938

Martins, A., Fantini, M. C. A., Souza Neto, N. M., Ramos, A. Y., Santos, A. D.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 305: 152-6 (2006)

- ²⁴ *Assessment of heavy metal accumulation in two species of Tillandsia in relation to atmospheric emission sources in Argentina* 1940

Wannaz, E. D., Carreras, H. A., Perez, C. A., Pignata, M. L.

Science of the Total Environment, 361: 267-78 (2006)

- ²⁵ *Structure, morphology, and composition of nanometric Pd films deposited by dc magnetron sputtering on Cu, Ag, and Au foils* 1996

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

Materials Science and Engineering A, 432: 303-7 (2006)

- ²⁶ *Crystallization, data collection and phasing of two digestive lysozymes from Musca domestica* 1998

Marana, S, R., Barbosa, J. A. R. G.

Acta Crystallographica F, 62: 750-2 (2006)

- ²⁷ *Elemental distribution in breast tissue samples using X-ray fluorescence microtomography* 2017

Pereira, G. R., Conceição, S. C., Lopes, R. T., Anjos, M. J. dos, Oliveira, L. F. de, Rocha, H. S., Perez, C. A.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 269: 469-73 (2006)

- ²⁸ *Blends of styrene butadiene styrene TRI block copolymer/polyaniline-characterization by WAXS* 1793

Souza Jr., F. G., Soares, B. G., Mantovani, G. L., Manjunath, A., Somashekarappa, H., Somashekar, R., Siddaramaiah

Polymer, 47: 2163-71 (2006)

- ²⁹ *Characterization of Mn(III) porphyrin immobilized on modified silica surface by EXAFS spectroscopy: a promising tool for analysis of supported metalloporphyrin catalysts* 1795

Ferreira, A. D. Q., Vinhado, F. S., Iamamoto, Y.

Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, 243: 111-9 (2006)

- ³⁰ *Distortion of ReO₆ octahedron in the Hg_{0.82}Re_{0.18}Ba₂Ca₂Cu₃O_{8+d} superconductor* 1796

Orlando, M. T. D., Passos, C. A. C., Passamai Jr., J. L., Medeiros, E. F., Orlando, C. G. P., Sampaio, R. V., Corrêa, H. P. S., Melo, F. C. L. de, Martinez, L. G., Rossi, J. L.

Physica C - Superconductivity and Its Application, 434: 53-61 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

³¹ *Evidence of site-specific fragmentation on thioacetic acid, CH₃C(O)SH, irradiated with synchrotron radiation around the S 2p and O 1s regions* 1798

Erben, M. F., Geronés, M., Romano, R. M., Della Védova, C. O.

Journal of Physical Chemistry A, 110: 875-83 (2006)

³² *Investigations into the early stages of "in vitro" calcification on chitosan films* 1801

Aimoli, C. G., Torres, M. A., Beppu, M. M.

Materials Science and Engineering C, 26: 78-86 (2006)

³³ *Nanostructure and luminescent properties of sol-gel derived europium-doped amine functionalised hybrids* 1804

Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Sá Ferreira, R. A., Carlos, L. D., Zea Bermudez, V. de, Craievich, A. F.

Journal of Sol-Gel Science and Technology, 37: 99-104 (2005)

³⁴ *XAFS characterization of La_{1-x}Sr_xMnO₃+sigma catalysts prepared by Pechini's method* 1807

Melo, D. M. A., Borges, F. M. M., Ambrósio, R. C., Pimentel, P. M., Silva Jr., C. N. da, Melo, M. A. F. de

Chemical Physics, 322: 477-84 (2006)

³⁵ *Induction of relaxor state in ordinary ferroelectrics by isovalent ion substitution: a petransitional martensitic texture case* 1812

Lente, M. H., Moreira, E. N., Garcia, D., Eiras, J. A., Neves, P. P., Doriguetto, A. C., Mastelaro, V. R., Mascarenhas, Y. P.

Physical Review B, 73: 054106-1-6 (2006)

³⁶ *Small angle X-ray scattering study of surface modified tin oxide nanoparticles prepared by sol-gel route* 1815

Kawaguti, C. A., Pulcinelli, S. H., Santilli, C. V., Craievich, A. F.

Journal of Sol-Gel Science and Technology, 37: 213-7 (2006)

³⁷ *Electronic structure and doping behavior of PANI-NSA nanofibers investigated by resonance Raman spectroscopy* 1822

Nascimento, G. M. do, Silva, C. H. B., Temperini, M. L. A.

Macromolecular Rapid Communications, 27: 255-9 (2006)

³⁸ *Photon stimulated ion desorption from condensed chloroform on Si(100) at the Cl and Si K-edges* 1824

Rocco, M. L. M., Mota, G. V. S., Pinho, R. R.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 151: 135-9 (2006)

- ³⁹ *Photon stimulated ion desorption studies from poly(sulphone) using synchrotron radiation in a single-bunch mode* 1825

Weibel, D. E., Rocco, M. L. M., Pontes, F. C., Ferreira, M., Souza, G. G. B. de

Polymer Degradation and Stability, 91: 712-8 (2006)

- ⁴⁰ *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of the lectin from Dioclea rostrata Benth seeds* 1826

Delatorre, P., Nascimento, K. S., Melo, L. M., Souza, E. P., Rocha, B. A. M., Benevides, R. G., de Oliveira, T. M., Bezerra, G. A., Bezerra, M. J. B., da Cunha, R. M. S., da Cunha, F. A. B., Freire, V. N., Cavada, B. S.

Acta Crystallographica F, 62: 166-8 (2006)

- ⁴¹ *Purification, partial characterization and preliminary X-ray diffraction analysis of a mnnose-specific lectin from Cymbosema roseum seeds* 1827

Cavada, B. S., Marinho, E. S., Souza, E. P., Benevides, R. G., Delatorre, P., Souza, L. A. G., Nascimento, K. S., Sampaio, A. H., Moreno, F. B. M. B., Rustiguel, J. K. R., Canduri, F., Azevedo Jr., W. F. de, Debray, H.

Acta Crystallographica F, 62: 235-7 (2006)

- ⁴² *Al-based anodic oxide films structure observation using field emission gun scanning electron microscopy* 1831

Regone, N. N., Freire, C. M. A., Ballester, M.

Journal of Materials Processing Technology, 172: 146-51 (2006)

- ⁴³ *Crystal structure of a lectin from Canavalia maritima (ConM) in complex with trehalose and maltose reveals relevant mutation in ConA-like lectins* 1845

Delatorre, P., Rocha, B. A. M., Gadelha, C. A. de A., Santi-Gadelha, T., Cajazeiras, J. B., Souza, E. P., Nascimento, K. S., Freire, V. N., Sampaio, A. H., Azevedo Jr., W. F. de, Cavada, B. S.

Journal of Structural Biology, 154: 280-6 (2006)

- ⁴⁴ *Correlation of PECVD SiOxNy dielectric layer structural properties and Si/SiOxNy/Al capacitors interface electrical properties* 1853

Albertin, K. F., Pereyra, I.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 1438-43 (2006)

- ⁴⁵ *Local bonding in PECVD-SiOxNy films* 1854

Criado, D., Alayo, M. I., Fantini, M. C. A., Pereyra, I.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 1298-302 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

⁴⁶ *Diffusion and mathematical modeling of release profiles from nanocarriers* ¹⁸⁶⁷

Cruz, L., Soares, L. U., Dalla Costa, T., Mezzalira, G., Silveira, N. P. da, Guterres, S. S., Pohlmann, A. R.

International Journal of Pharmaceutics, 313: 198-205 (2006)

⁴⁷ *Luminescent europium complexes encapsulated in cage-like cubic ordered mesoporous silica* ¹⁸⁶⁸

da Silva, L. C. C., Martins, T. S., Santos Filho, M., Teotônio, E. E. S., Isolani, P. C., Brito, H. F., Tabacniks, M. H., Fantini, M. C. A., Matos, J. R.

Microporous and Mesoporous Materials, 92: 94-100 (2006)

⁴⁸ *Microstructural analyses of the nanoparticles obtained after laser irradiation of Ti and W in ethanol* ¹⁸⁶⁹

Lima, M. S. F., Ladário, F. P., Riva, R.

Applied Surface Science, 252: 4420-4 (2006)

⁴⁹ *Poly(3-methyl thiophene)/PVDF composite as an electrode for supercapacitors* ¹⁸⁷⁰

Fonseca, C. P., Benedetti, J. E., Neves, S.

Journal of Power Sources, 158: 789-94 (2006)

⁵⁰ *Redox behavior of nanohybrid material with defined morphology: vanadium oxide nanotubes intercalated with polyaniline* ¹⁸⁷¹

Malta, M., Louarn, G., Errien, N., Torresi, R. M.

Journal of Power Sources, 156: 533-40 (2006)

⁵¹ *Sonochemically synthesized Ni(OH)₂ and Co(OH)₂ nanoparticles and their application in electrochromic electrodes* ¹⁸⁷²

Vidotti, M., van Greco, C., Ponzio, E. A., Torresi, S. I. C. de

Electrochemistry Communications, 8: 554-60 (2006)

⁵² *Structure of myotoxin II, a catalytically inactive Lys49 phospholipase A2 homologue from *Atropoides nummifer* venom* ¹⁸⁷³

Murakami, M. T., Melo, C. C., Angulo, Y., Lamonte, B., Arni, R. K.

Acta Crystallographica F, 62: 423-6 (2006)

⁵³ *Structure and properties of Ti⁴⁺-ureasil organic-inorganic hybrids* ¹⁸⁷⁵

Molina, C., Dahmouche, K., Hammer, P., Bermudez, V. D., Carlos, L. D., Ferrari, M., Montagna, M., Gonçalves, R. R., de Oliveira, L. F. C., Edwards, H. G. M., Messaddeq, Y., Ribeiro, S. J. L.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Journal of Brazilian Chemical Society, 17: 443-52 (2006)

⁵⁴ *Heavy metals in groundwater using synchrotron radiation total reflection X-ray analysis* 1879

Moreira, S., Ficarís, M., Vives, A. E. S., Nascimento Filho, V. F., Zucchi, O. L. A. D., Barroso, R. C., Jesus, E. F. O. de

Instrumentation Science & Technology, 34: 567-85 (2006)

⁵⁵ *Catechol biosensing using a nanostructured layer-by-layer film containing Cl-catechol 1,2-dioxygenase* 1881

Baptista, M. S., Riul Jr., A., Araújo, A. P. U. de, Oliveira Jr., O. N.

Biosensors & Bioelectronics, 21: 1320-6 (2006)

⁵⁶ *Comparative study of first- and second-order Raman spectra of MWCNT at visible and infrared laser excitation* 1898

Antunes, E. F., Lobo, A. O., Corat, E. J., Trava-Airoldi, V. J., Martin, A. A., Verissimo, C.

Carbon, 44: 2202-11 (2006)

⁵⁷ *Crystal structure of pure ZrO₂ nanopowders* 1899

Lamas, D. G., Rosso, A. M., Suarez Anzorena, M., Bellino, M. G., Fernández, A., Cabezas, M. D., Walsöe de Reça, N. E., Craievich, A. F.

Scripta Materialia, 55: 553-6 (2006)

⁵⁸ *Electronic structure of Pb_{1-x}LaxTiO₃ ferroelectric materials from Ti 2p and O 1s soft X-ray absorption spectroscopy* 1900

Mastelaro, V. R., Neves, P. P., de Lazaro, S. R., Longo, E., Michalowicz, A., Eiras, J. A.

Journal of Applied Physics, 99: 044104-1-4 (2006)

⁵⁹ *Fe-ZSM-11 magnetic properties: its relation with the catalytic activity for NO_xSCR with iso-butane and O₂* 1901

Anunziata, O. A., Gómez Costa, M., Beltramone, A. R.

Applied Catalysis A, 307: 263-9 (2006)

⁶⁰ *Ferromagnetic resonance studies in granular Co-SiO₂ thin films* 1902

Pires, M. J. M., Denardin, J. C., da Silva, E. C., Knobel, M.

Journal of Applied Physics, 99: 063908-1-6 (2006)

⁶¹ *Interaction of natural and crosslinked chitosan membranes with Hg(II) ions* 1903

Vieira, R. S., Beppu, M. M.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Colloids and Surfaces A, 279: 196-207 (2006)

⁶² *Investigations of the catalytic properties of manganese oxides for the oxygen reduction reaction in alkaline media* 1904

Lima, F. H. B., Calegari, M. L., Ticianelli, E. A.

Journal of Electroanalytical Chemistry, 590: 152-60 (2006)

⁶³ *Ion beam effects on the morphology and crystalline structure of Fe₇₀Co₃₀/Cu multilayers* 1905

Graff, I. L., Traverse, A., Teixeira, S. R., Amaral, L.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 249: 129-31 (2006)

⁶⁴ *Strain redistribution at the phase transition of MnAs/GaAs(001) films* 1906

Adriano, C., Giles, C., Couto, O. D. D., Brasil, M. J. S. P., Iikawa, F., Daweritz, L.

Applied Physics Letters, 88: 151906-1-3 (2006)

⁶⁵ *Structural evolution up to 1100°C of xerogels prepared from TEOS sonohydrolysis and liquid phase exchanged by acetone* 1907

Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Vollet, D. R., Maceti, H.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 167-73 (2006)

⁶⁶ *Study of the mechanical and structural properties of silicon oxynitride films for optical applications* 1908

Criado, D., Alayo, M. I., Fantini, M. C. A., Pereyra, I.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 2319-23 (2006)

⁶⁷ *Absolute calibration of optical tweezers* 1909

Viana, N. B., Mazolli, A., Maia Neto, P. A., Nussenzveig, H. M., Rocha, M. S., Mesquita, O. N.

Applied Physics Letters, 88: 131110-1-3 (2006)

⁶⁸ *Mass fractal characteristics of wet sonogels as determined by small-angle X-ray scattering and differential scanning calorimetry* 1912

Vollet, D. R., Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Gatto, F. R.

Physical Review B, 74: 024208-1-7 (2006)

⁶⁹ *Liquid crystalline phases of monoolein and water for topical delivery of cyclosporin A: characterization and study of in vitro and in vivo delivery* 1915

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Lopes, L. B., Lopes, J. L. C., Oliveira, D. C. R., Thomazini, J. A., Garcia, M. T. J., Fantini, M. C. A., Collett, J. H., Bentley, M. V. L. B.

European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics, 63: 146-55 (2006)

⁷⁰ *Local structure of the metal-oxygen bond in compositionally homogeneous, nanocrystalline zirconia-ceria solid solutions synthesized by a gel-combustion process* 1916

Fábregas, I. O., Fuentes, R. O., Lamas, D. G., Fernández de Rapp, M. E., de Reça, N. E. W., Fantini, M. C. A., Craievich, A. F., Prado, R. J., Millen, R. P., Temperini, M. L. A.

Journal of Physics Condensed Matter, 18: 7863-81 (2006)

⁷¹ *Reverse hexagonal phase nanodispersion on monoolein and oleic acid for topical delivery of peptides: in vitro and in vivo skin penetration of cyclosporin A* 1919

Lopes, L. B., Ferreira, D. A., de Paula, D., Garcia, M. T. J., Thomazini, J. A., Fantini, M. C. A., Bentley, M. V. L. B.

Pharmaceutical Research, 23: 1332-42 (2006)

⁷² *Theoretical and experimental study of a praziquantel and Beta-cyclodextrin inclusion complex using molecular mechanic calculations and 1H-nuclear magnetic resonance* 1921

de Jesus, M. B., Pinto, L. M. A., Fraceto, L. F., Takahata, Y., Lino, A. C. S., Jaime, C., Paula, E.

Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 41: 1428-32 (2006)

⁷³ *X-ray absorption spectroscopy study of FePt thin films* 1922

Souza Neto, N. M., Martins, A., Fantini, M. C. A., Santos, A. D., Prado, R. J., Ramos, A. Y.

Journal of Applied Physics, 100: 013905-1-6 (2006)

⁷⁴ *Synthesis and characterization of catalytic iridium nanoparticles in imidazolium ionic liquids* 1924

Fonseca, G. S., Machado, G., Teixeira, S. R., Fecher, G. H., Morais, J. de, Alves, M. C. M., Dupont, J.

Journal of Colloid and Interface Science, 301: 193-204 (2006)

⁷⁵ *Interaction of alpha-Synuclein with divalent metal ions reveals key differences: a link between structure, binding specificity and fibrillation enhancement* 1928

Binolfi, A., Rasia, R. M., Bertoncini, C. W., Zweckstetter, M., Ceolín, M. R., Griesinger, C., Jovin, T. M., Fernández, C. O.

Journal of the American Chemical Society, 128: 9893-9901 (2006)

⁷⁶ *Study of protein detection and ultrastructure of brazilian rice starch during alkaline extraction* 1929

Cardoso, M. B., Samios, D., Silveria, N. P.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Starch / Stärke, 58: 345-52 (2006)

⁷⁷ *Influence of processing parameters of partial-melting process on phase assemblage, microstructure and superconducting properties of Bi-2212 bulk material* 1931

Marinkovic, B. A., Xia, S. K., Serra, E. T., Rizzo, F.

Materials Chemistry and Physics, 91: 301-12 (2005)

⁷⁸ *Interaction of phenothiazine compounds with zwitterionic lysophosphatidylcholine micelles: small angle X-ray scattering, electronic absorption spectroscopy, and theoretical calculations* 1934

Barbosa, L. R. S., Caetano, W., Itri, R., Homem-de-Mello, P., Santiago, P. S., Tabak, M.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 13086-93 (2006)

⁷⁹ *Measurement of L subshell fluorescence yields of elements in the range $\leq Z \leq 50$ using synchrotron radiation* 1936

Bonzi, E., Badiger, N. M.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 248: 242-6 (2006)

⁸⁰ *Measurement of the radiative vacancy transfer probabilities from the L3 to M and to N shells for W, Re and Pb using synchrotron radiation* 1937

Bonzi, E.

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 245: 363-6 (2006)

⁸¹ *Yeast oxidative stress response influences of cytosolic thioredoxin peroxidase I and of the mitochondrial functional state* 1939

Demasi, M., Pereira, G. A. G., Netto, L. E. S.

The FEBS Journal, 273: 805-16 (2006)

⁸² *Elemental concentration in the cortex and hippocampus of wistar rats by X-ray total reflection fluorescence with synchrotron radiation* 1942

de Jesus, E. F. O., Serpa, R. F. B., Anjos, M. J. dos, Lopes, R. T., Carmo, M. G. T. do, Moreira, S., Rocha, M. S., Martinez, A. M. B.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 269: 647-52 (2006)

⁸³ *Trace and major elements in serum of patients with chronic myelogenous leukemia* 1943

Canellas, C. G. L., Carvalho, S. M. F., de Jesus, E. F. O., Anjos, M. J. dos, Lopes, R. T.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 269: 631-4 (2006)

⁸⁴ *Functionalized mesoporous hybrid thin films as selective membranes* 1944

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Otal, E. H., Angelomé, P. C., Bilmes, S. A., Soler-Illia, G. J. A. A.

Advanced Materials, 18: 934-8 (2006)

⁸⁵ *Influence of synthesis temperature on the structural characteristics of mesoporous silica* ¹⁹⁴⁵

Sousa, A., Souza, E. M. B. de

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 3451-6 (2006)

⁸⁶ *SBA-15-collagen hybrid material for drug delivery applications* ¹⁹⁴⁶

Fagundes, L. B., Sousa, T. G. F., Sousa, A., Silva, V. V., Sousa, E. M. B.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 3496-3501 (2006)

⁸⁷ *Photodissociation of organic molecules in star-forming regions. II. Acetic acid* ¹⁹⁴⁷

Pilling, S., Santos, A. C. F., Boechat-Roberty, H. M.

Astronomy & Astrophysics, 449: 1289-96 (2006)

⁸⁸ *Structural characterization of $Pb_{1-x}BaxZr_{0.65}Ti_{0.35}O_3$ ferroelectric ceramics* ¹⁹⁵¹

Mastelaro, V. R., Doriguetto, A. C., Neves, P. P., Garcia, D., Lente, M. H., Mascarenhas, Y. P., Michalowicz, A., Eiras, J. A.

Ferroelectrics, 339: 219-26 (2006)

⁸⁹ *Multifunctional, multilayer, multiscale: integrative synthesis of complex macroporous and mesoporous thin films with spatial separation of porosity and function* ¹⁹⁵⁷

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

Advanced Materials, 18: 2397-2402 (2006)

⁹⁰ *X-ray resonant Raman scattering cross sections of Mn, Fe, Cu and Zn* ¹⁹⁵⁹

Sánchez, H. J., Valentinuzzi, M. C., Perez, C. A.

Journal of Physics B, 39: 4317-27 (2006)

⁹¹ *Crystallization and preliminary X-ray diffraction analysis of prephenate dehydratase from Mycobacterium tuberculosis H37Rv* ¹⁹⁶⁰

Vivan, A. L., Dias, M. V. B., Schneider, C. Z., Azevedo Jr., W. F. de, Basso, L. A., Santos, D. S.

Acta Crystallographica F, 62: 357-60 (2006)

⁹² *Local and nanoscopic structure of potassium triflate-doped siloxane-polyoxyethylene ormolytes* ¹⁹⁶⁴

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Chaker, J. A., Dahmouche, K., Santilli, C. V., Pulcinelli, S. H., Gonçalves, M. C., Gomes Correia, S. M., Bermudez, V. D., Judeinstein, P., Briois, V., Craievich, A. F.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 3457-62 (2006)

⁹³ *Montmorillonite (MMT) effect on the structure of poly(oxyethylene) (PEO)-MMT nanocomposites and silica-PEO-MMT hybrid materials* 1965

Hikosaka, M. Y., Pulcinelli, S. H., Santilli, C. V., Dahmouche, K., Craievich, A. F.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 3705-10 (2006)

⁹⁴ *Structural insights into the catalytic mechanism of sphingomyelinases D and evolutionary relationship to glycerophosphodiester phosphodiesterases* 1966

Murakami, M. T., Andrade, S. A. de, Tambourgi, D. V., Arni, R. K.

Biochemical and Biophysical Research Communications, 342: 323-9 (2006)

⁹⁵ *Substrate development for surface-enhanced Raman study of photocatalytic degradation processes: Congo red over silver modified titanium dioxide films* 1968

Bonancêa, C. E., Nascimento, G. M. do, de Souza, M. L., Temperini, M. L. A., Corio, P.

Applied Catalysis B, 69: 35-43 (2006)

⁹⁶ *Elucidando os estados de oxidação do nitrogênio através da espectroscopia de absorção de raios-X na borda K do nitrogênio* 1969

Nascimento, G. M. do, Temperini, M. L. A.

Química Nova, 29: 823-8 (2006)

⁹⁷ *Structural analysis of N-acetylglucosamine-6-phosphate deacetylase apoenzyme from Escherichia coli* 1970

Ferreira, F. M., Mendoza-Hernández, G., Castañeda-Bueno, M., Aparicio, R., Fischer, H., Calcagno, M. L., Oliva, G.

Journal of Molecular Biology, 359: 308-21 (2006)

⁹⁸ *Direct observation of potential barriers in semiconducting barium titanate by electric force microscopy* 1973

Mancini, M. W., Paulin-Filho, P. I.

Journal of Applied Physics, 100: 104501-1-6 (2006)

⁹⁹ *Structural characteristics of silica sonogels prepared with additions of isopropyl alcohol* 1978

Donatti, D. A., Ibanez Ruiz, A., Kumakawa, M. M., Vollet, D. R.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 21582-7 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

¹⁰⁰ *Resistivity study of the pseudogap phase for (Hg,Re)-1223 superconductors* ¹⁹⁷⁹

Passos, C. A. C., Orlando, M. T. D., Passamai Jr., J. L., de Mello, E. V. L., Corrêa, H. P. S., Martinez, L. G.

Physical Review B, 74: 094514-1-10 (2006)

¹⁰¹ *Pt-Co/C nanoparticles as electrocatalysts for oxygen reduction in H₂SO₄ and H₂SO₄/CH₃OH electrolytes* 1981

Lima, F. H. B., Lizcano-Valbuena, W. H., Teixeira-Neto, E., Nart, F. C., Gonzalez, E. R., Ticianelli, E. A.

Electrochimica Acta, 52: 385-93 (2006)

¹⁰² *Exciton g factor of type-II InP/GaAs single quantum dots* ¹⁹⁸²

Godoy, M. P. F., Gomes, P. F., Nakaema, M. K. K., Iikawa, F., Brasil, M. J. S. P., Caetano, R. A.,
Madureira, J. R., Bortoleto, J. R. R., Cotta, M. A., Ribeiro, E., Marques, G. E.

Physica B - Condensed Matter, 384: 332-5 (2006)

¹⁰³ *Piezoelectric coefficients d₁₄, d₁₆, d₃₄, and d₃₆ of an L-arginine hydrochloride monohydrate crystal by X-ray three-beam diffraction* 1983

Almeida, J. M. A., Miranda, M. A. R., Avanci, L. H., de Menezes, A. S., Cardoso, L. P., Sasaki, J. M.

Journal of Synchrotron Radiation, 13: 435-9 (2006)

¹⁰⁴ *In situ and simultaneous nanostructural and spectroscopic studies of ZnO nanoparticle and Zn-HDS formations from hydrolysis of ethanolic zinc acetate solutions induced by water* 1985

Briois, V., Giorgetti, C., Dartyge, E., Baudalet, F., Tokumoto, M. S., Pulcinelli, S. H., Santilli, C. V.

Journal of Sol-Gel Science and Technology, 39: 25-36 (2006)

¹⁰⁵ *Analysis of beers from Brazil with synchrotron radiation total reflection X-ray fluorescence* 1987

Moreira, S., Vives, A. E. S., Zucchi, O. L. A. D., Jesus, E. F. O. de, Nascimento Filho, V. F., Brienza, S. M. B.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 270: 167-71 (2006)

¹⁰⁶ *Analysis of fish samples for environmental monitoring and food safety assessment by synchrotron radiation total reflection X-ray fluorescence* 1988

Vives, A. E. S., Moreira, S., Brienza, S. M. B., Zucchi, O. L. A. D., Nascimento Filho, V. F.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 270: 231-6 (2006)

¹⁰⁷ *Synchrotron radiation total reflection X-ray fluorescence (SR-TXRF) for evaluation of food contamination* 1989

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Vives, A. E. S., Moreira, S., Brienza, S. M. B., Zucchi, O. L. A. D., Nascimento Filho, V. F.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 270: 147-53 (2006)

¹⁰⁸ *Evaluation of element availability in bottom sediments by synchrotron total reflection X-ray fluorescence analysis (SR-TXRF)* 1990

Moreira, S., Vives, A. E. S., Nascimento Filho, V. F., Zucchi, O. L. A. D., Brienza, S. M. B.

Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 270: 87-91 (2006)

¹⁰⁹ *Divalent metal requirements for catalysis and stability of the RNA triphosphatase from Trypanosoma cruzi* 1992

Kikuti, C. M., Tersariol, I. L. S., Schenkman, S.

Molecular & Biochemical Parasitology, 150: 83-95 (2006)

¹¹⁰ *Post-translational modifications of Trypanosoma cruzi histone H4* 1993

da Cunha, J. P. C., Nakayasu, E. S., Almeida, I. C., Schenkman, S.

Molecular & Biochemical Parasitology, 150: 268-77 (2006)

¹¹¹ *Dynamic and static adsorption and desorption of Hg(II) ions on chitosan membranes and spheres* 1994

Vieira, R. S., Beppu, M. M.

Water Research, 40: 1726-34 (2006)

¹¹² *The influence of urea on the structure of proteins in reversed micelles* 1995

Caetano, W., Amaral, C. L. C., Itri, R.

Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 6: 2416-24 (2006)

¹¹³ *Design of novel hybrid organic-inorganic nanostructured biomaterials for immunoassay applications* 2002

Andrade, G., Barbosa-Stancioli, E. F., Mansur, A. A. P., Vasconcelos, W. L., Mansur, H. S.

Biomedical Materials, 1: 221-34 (2006)

¹¹⁴ *Structural, thermal and optical studies of mechanical alloyed Ga₄₀Se₆₀ mixture* 2003

Souza, S. M. de, Campos, C. E. M., Lima, J. C., Grandi, T. A., Pizani, P. S.

Solid State Communications, 139: 70-5 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

115 *Protein immobilization in PVA hydrogel: a synchrotron SAXS and FTIR study* 2005

Mansur, H. S., Mansur, A. A. P., Oréface, R. L.

Solid State Phenomena, 121-123: 1355-8 (2006)

116 *Synchrotron SAX, XRD and FTIR characterization of nanostructured PVA/TEOS hybrid cross-linked with glutaraldehyde* 2006

Mansur, H. S., Mansur, A. A. P.

Solid State Phenomena, 121-123: 855-8 (2006)

117 *Magnetic nanocomposite thin films prepared by sol-gel process* 2007

Mohalem, N. D. S., Seara, L. M., Novak, M. A., Sinnecker, E. H. C. P.

Brazilian Journal of Physics, 36:1078-80 (2006)

118 *Nanocrystalline titanium oxide thin films prepared by sol-gel process* 2008

Viana, M. M., Mohallem, T. D. S., Nascimento, G. L. T., Mohalem, N. D. S.

Brazilian Journal of Physics, 36: 1081-3 (2006)

119 *Physico-chemical characterization and in vivo evaluation of indomethacin ethyl ester-loaded nanocapsules by PCS, TEM, SAXS, interfacial alkaline hydrolysis and antiedematogenic activity* 2009

Cruz, L., Schaffazick, S. R., Costa, T. D., Soares, L. U., Mezzalira, G., da Silveira, N. P., Schapoval, E. E. S., Pohlmann, A. R., Guterres, S. S.

Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 6: 3154-62 (2006)

120 *Complex polyion - surfactant ion salts in equilibrium with water: changing aggregate shape and size by adding oil* 2010

Bernardes, J. S., Norrman, J., Picullel, L., Loh, W.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 23433-42 (2006)

121 *Superconducting fault current limiter device based on (Hg, Re)-1223 superconductor* 2013

Passos, C. A. C., Orlando, M. T. D., Passamai Jr., J. L., Medeiros, E. F., Oliveira, F. D. C., Fardin, J. F., Simonetti, D. S. L.

Applied Physics Letters, 89: 242503-1-3 (2006)

122 *AFM characterization of barium titanate* 2014

Gheno, S. M., Hasegawa, H. L., Paulin-Filho, P. I.

Ferroelectrics, 334: 43-8 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

123 *Atomic force microscopy studies of twins in yttrium-doped barium titanate* 2015

Gheno, S. M., Hasegawa, H. L., Paulin-Filho, P. I.

Journal of Physics and Chemistry of Solids, 67: 2253-6 (2006)

124 *A novel linear piezoelectric motor with complex vibration modes* 2016

Ibrahim, R. C.

Ferroelectrics, 338: 65-72 (2006)

125 *Ionic desorption in valence- and core- excited polymers: poly(vinyl chloride) and poly(vinylidene chloride)* 2018

Rocco, M. L. M., Faraudo, G. S., Pontes, F. C., Souza, G. G. B. de, Pinho, R. R., Ferreira, M.

Brazilian Journal of Physics, 36: 534-7 (2006)

126 *Influence of N-doping on the structure and electronic properties of titania nanoparticle photocatalysis* 2019

Stewart, S. J., Fernández-García, M., Belver, C., Mun, B. S., Requejo, F. G.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 16482-6 (2006)

127 *Electrocatalytic activity of dispersed platinum and silver alloys and manganese oxides for the oxygen reduction in alkaline electrolyte* 2020

Lima, F. H. B., Calegari, M. L., Ticianelli, E. A.

Russian Journal of Electrochemistry, 42: 1283-90 (2006)

128 *Different carbon nanostructured materials obtained in catalytic chemical vapor deposition* 2021

Verissimo, C., Moshkalyov, S. A., Ramos, A. C. S., Gonçalves, J. L., Alves, O. L., Swart, J. W.

Journal of Brazilian Chemical Society, 17: 1124-32 (2006)

129 *Microstructural modifications in macroporous oxides prepared via latex templating: synthesis and thermal stability of porous microstructure* 2022

Verissimo, C., Alves, O. L.

Journal of the American Ceramic Society, 89: 2226-31 (2006)

130 *XAS of high pressure Xe clusters in amorphous carbon and computational simulation for the fcc and hcp xenon crystalline phases* 2023

Oliveira Jr., M. H., Marques, F. C.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Brazilian Journal of Physics, 36: 282-5 (2006)

- 131 *Tube atomizers in thermospray flame furnace atomic absorption spectrometry: characterization using X-ray fluorescence, scanning electron microscopy and chemometrics* 2024

Petrucci, G. A., Stocco, P. K., Bueno, M. I. M. S., Pereira-Filho, E. R.

Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 21: 1298-1304 (2006)

- 132 *Influence of nucleation parameters in the spatial distribution of the Ge nanocrystals formed by LPCVD* 2025

Marins, E. S., Mestanza, S. N. M., Doi, I.

Materials Science in Semiconductor Processing, 9: 828-31 (2006)

- 133 *Precipitation of calcium phosphate and calcium carbonate induced over chitosan membranes: a quick method to evaluate the influence of polymeric matrices in heterogeneous calcification* 2029

Aimoli, C. G., Beppu, M. M.

Colloids and Surfaces B, 53: 15-22 (2006)

- 134 *Cognitive impairment related changes in the elemental concentration in the brain of old rat* 2033

Serpa, R. F. B., Jesus, E. F. O. de, Anjos, M. J. dos, Lopes, R. T., Carmo, M. G. T. do, Rocha, M. S., Rodrigues, L. C., Moreira, S., Martinez, A. M. B.

Spectrochimica Acta B, 61: 1219-23 (2006)

- 135 *Elemental concentration analysis in brain structures from young, adult and old wistar rats by total reflection X-ray fluorescence with synchrotron radiation* 2034

Serpa, R. F. B., Jesus, E. F. O. de, Anjos, M. J. dos, Carmo, M. G. T. do, Moreira, S., Rocha, M. S., Martinez, A. M. B., Lopes, R. T.

Spectrochimica Acta B, 61: 1205-9 (2006)

- 136 *Monitoring of the environmental pollution by trace element analysis in tree-rings using synchrotron radiation total reflection X-ray fluorescence* 2035

Vives, A. E. S., Moreira, S., Brienza, S. M. B., Medeiros, J. G. da S., Tomazello Filho, M., Zucchi, O. L. A. D., Nascimento Filho, V. F.

Spectrochimica Acta B, 61: 1170-4 (2006)

- 137 *Letter to the editor: 1H , ^{13}C and ^{15}N resonance assignments for the reduced forms of thioredoxin 1 and 2 from *S. cerevisiae** 2037

Pinheiro, A. S., Amorim, G. C., Netto, L. E. S., Valente, A. P., Almeida, F. C. L.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Journal of Biomolecular NMR, 36: 35 (2006)

138 *Carbon fibers with cup-stacked-type structure: an advantageous support for Pt-Ru catalyst in methanol oxidation* 2038

de Moraes, I. R., da Silva, W. J., Tronto, S., Rosolen, J. M.

Journal of Power Sources, 160: 997-1002 (2006)

139 *Carbon nanotube/felt composite electrodes without polymer binders* 2039

Rosolen, J. M., Matsubara, E. Y., Marchesin, M. S., Lala, S. M., Montoro, L. A., Tronto, S.

Journal of Power Sources, 162: 620-8 (2007)

140 *A multi-step treatment to effective purification of single-walled carbon nanotubes* 2040

Montoro, L. A., Rosolen, J. M.

Carbon, 44: 3293-3301 (2006)

141 *Effects of magnetic interparticle coupling in the blocking temperature of granular Co multilayers* 2041

Denardin, J. C., Nunes, W. C., Knobel, M.

Physica B - Condensed Matter, 384: 290-3 (2007)

142 *Theoretical and experimental analysis of ammonia ionic clusters produced by 252Cf fragment impact on an NH₃ ice target* 2044

Fernandez-Lima, F. A., Ponciano, C. R., Nascimento, M. A. C., Silva, E. C. F. da

Journal of Physical Chemistry B, 110: 10018-24 (2006)

143 *Espectroscopia de fotoelétrons de limiares de átomos e moléculas* 2045

Lopes, M. C. A., Couto, H., Moreira, C. D., Silva, H.

Química Nova, 29: 156-9 (2006)

144 *Ionization and dissociation of the formic acid molecule by protons and electrons* 2046

Barilo, S. N., Pilling, S., Santos, A. C. F., Boechat-Roberty, H. M., Souza, G. G. B. de, Sant'Anna, M. M., Barros, A. L. F., Wolff, W., Faria, N. V. de C.

Brazilian Journal of Physics, 36: 538-40 (2006)

145 *Photon stimulated ion desorption of condensed CO₂ at ~85 K studied by synchrotron radiation* 2048

Mota, G. V. S., Weibel, D. E., Araújo, G. S., Rocco, M. L. M.

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Brazilian Journal of Physics, 36: 975-7 (2006)

146 *Electron field emission of carbon nanotubes on carbon felt* ²⁰⁴⁹

Rosolen, J. M., Poá, C. H. P., Tronto, S., Marchesin, M. S., Silva, S. R. P.

Chemical Physics Letters, 424: 151-5 (2006)

147 *Aspectos estruturais relacionados ao processo de troca iônica no niobato lamelar K4Nb6O17* 2052

Bizeto, M. A., Christino, F. P., Tavares, M. F. M., Constantino, V. R. L.

Química Nova, 29: 1215-20 (2006)

148 *Evaluation of hexaniobate nanoscrolls as support for immobilization of a copper complex catalyst* 2053

Bizeto, M. A., Alves, W. A., Barbosa, C. A. S., Ferreira, A. M. D. C., Constantino, V. R. L.

Inorganic Chemistry, 45: 6214-21 (2006)

149 *Spectroscopic characterization of polyaniline doped with transition metal salts* ²⁰⁵⁴

Izumi, C. M. S., Constantino, V. R. L., Ferreira, A. M. D. C., Temperini, M. L. A.

Synthetic Metals, 156: 654-63 (2006)

150 *Molecular conformation changes in alkylthiol ligands as a function of size in gold nanoparticles: X-ray absorption studies* 2060

Ramallo-López, J. M., Giovanetti, L., Requejo, F. G., Isaacs, S. R., Shon, Y. S., Salmeron, M.

Physical Review B, 74: 073410-1-4 (2006)

151 *Structural and magnetic characterization of Fe_{0.3}Ti_{0.7}O₂-delta films obtained by pulsed laser deposition* 2061

Rodriguez Torres, C. E., Duhalde, S., Cabrera, A. F., Sánchez, F. H., Chillote, C., Vignolo, M. F.

Physica B - Condensed Matter, 384: 341-4 (2006)

152 *Characterization by ²⁷Al NMR, X-ray absorption spectroscopy, and density functional theory techniques of the species responsible for benzene hydrogenation in Y zeolite-supported carburized molybdenum catalysts* 2063

Rocha, A. S., da Silva, V. T., Eon, J. G., Faro Jr., A. C., Rocha, A. B.

Journal of Physical Chemistry B, 110: 15803-11 (2006)

153 *A structural analysis of lead hydroxyvanadinite* ²⁰⁶⁴

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Eon, J. G., Boechat, C. B., Rossi, A. M., Terra, J., Ellis, D. E.

Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP), 8: 1845-51 (2006)

¹⁵⁴ *Cationic and anionic fragmentation of dichloromethane following inner-shell (Cl 1s) photoexcitation* 2065

Lago, A. F., Dávalos, J. Z., Kerdpin, U., Schlachter, A. S.

Journal of Physical Chemistry A, 110: 13717-23 (2006)

¹⁵⁵ *Oxygen plasma etching of carbon nano-structures containing nitrogen* ¹⁸²⁰

Acuña, L. M., Figueroa, C. A., Ribeiro, C. T. M., Alvarez, F.

Journal of Non-Crystalline Solids, 352: 1314-8 (2006)

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Artigo publicado em 2006 em Periódico Indexado com fator de impacto superior a 5.

¹ *Structural rearrangements in the thyroid hormone receptor hinge domain and their putative role in the receptor function* 1986

Nascimento, A. S., Dias, S. M. G., Aparicio, R., Nunes, F. M., Ambrosio, A. L. B., Bleicher, L., Figueira, A. C. M., Santos, M. A. M., Oliveira Neto, M., Fischer, H., Togashi, M., Craievich, A. F., Garratt, R. C., Baxter, J. D., Webb, P., Polikarpov, I.

Journal of Molecular Biology, 360: 586-98 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.229**

² *Solution conformation and heparin-induced dimerization of the full-length extracellular domain of the human amyloid precursor protein* 1805

Gralle, M., Oliveira, C. L. P., Guerreiro, L. H., McKinstry, W. J., Galatis, D., Masters, C. L., Cappai, R., Parker, M. W., Ramos, C. H. I., Torriani, I., Ferreira, S. T.

Journal of Molecular Biology, 357: 493-508 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.229**

³ *Tetramerization of the LexA repressor in solution: implications for gene regulation of the E. coli SOS system at acidic pH* 1847

Sousa, F. J. R., Lima, L. M. T. R., Pacheco, A. B. F., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Almeida, D. F., Foguel, D., Silva, J. L., Mohana-Borges, R.

Journal of Molecular Biology, 359: 1059-74 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.229**

⁴ *Structural insights into enzyme-substrate interaction and characterization of enzymatic intermediates of organic hydroperoxide resistance protein from Xylella fastidiosa* 1863

Oliveira, M. A., Guimarães, B. G., Cussioli, J. R. R., Medrano, F. J., Gozzo, F. C., Netto, L. E. S.

Journal of Molecular Biology, 359: 433-45 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.229**

⁵ *Structural analysis of N-acetylglucosamine-6-phosphate deacetylase apoenzyme from Escherichia coli* 1970

Ferreira, F. M., Mendoza-Hernández, G., Castañeda-Bueno, M., Aparicio, R., Fischer, H., Calcagno, M. L., Oliva, G.

Journal of Molecular Biology, 359: 308-21 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.229**

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

⁶ *Ionisation and dissociation of cometary gaseous organic molecules by solar wind particles - I: Formic acid* 2047

Pilling, S., Santos, A. C. F., Sant'Anna, M. M., Wolff, W., Barros, A. L. F., Souza, G. G. B. de, Faria, N. V. de C., Boechat-Roberty, H. M.

Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 372: 1379-88 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.352**

⁷ *FEZ1 dimerization and interaction with transcription regulatory proteins involves its coiled-coil region* 1799

Assmann, E. M., Alborghetti, M. R., Camargo, M. E. R., Kobarg, J.

Journal of Biological Chemistry, 281: 9869-81 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.854**

⁸ *The Pyrococcus exosome complex structural and functional characterization* 1865

Ramos, C. R. R., Oliveira, C. L. P., Torriani, I., Oliveira, C. C.

Journal of Biological Chemistry, 281: 6751-9 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **5.854**

⁹ *The HD-GYP domain of RpfG mediates a direct linkage between the Rpf quorum-sensing pathway and a subset of diguanylate cyclase proteins in the phytopathogen Xanthomonas axonopodis pv citri* 2030

Andrade, M. O., Alegria, M. C., Guzzo, C. R., Docena, C., Rosa, M. C. P., Ramos, C. H. I., Farah, C. S.

Molecular Microbiology, 62: 537-51 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **6.203**

¹⁰ *Interaction of alpha-Synuclein with divalent metal ions reveals key differences: a link between structure, binding specificity and fibrillation enhancement* 1928

Binolfi, A., Rasia, R. M., Bertoncini, C. W., Zweckstetter, M., Ceolín, M. R., Griesinger, C., Jovin, T. M., Fernández, C. O.

Journal of the American Chemical Society, 128: 9893-9901 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **7.419**

¹¹ *Landé g tensor in semiconductor nanostructures* 2069

Alegre, T. P. M., Hernández, F. G. G., Pereira, A. L. C., Medeiros-Ribeiro, G.

Physical Review Letters, 97: 236402-1-4 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **7.489**

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

¹² *Functionalized mesoporous hybrid thin films as selective membranes* ¹⁹⁴⁴

Otal, E. H., Angelomé, P. C., Bilmes, S. A., Soler-Illia, G. J. A. A.

Advanced Materials, 18: 934-8 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **9.106**

¹³ *Multifunctional, multilayer, multiscale: integrative synthesis of complex macroporous and mesoporous thin films with spatial separation of porosity and function* ¹⁹⁵⁷

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

Advanced Materials, 18: 2397-2402 (2006) - Fator de Impacto em 2005: **9.106**

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS **Relatório Anual de 2006**

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

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

Desde então foram apresentados os seguintes relatórios:

1. "RELATÓRIO 1 – PERÍODO janeiro a julho de 1998", em agosto de 1998;
2. "RELATÓRIO ANUAL – 1998", em fevereiro de 1999;
3. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a julho de 1999", em fevereiro de 1999;
4. "RELATÓRIO ANUAL – 1999", em fevereiro de 2000;
5. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a julho de 2000", em agosto de 2000;
6. "RELATÓRIO ANUAL – 2000", em fevereiro de 2001;
7. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2001", e agosto de 2001;
8. "RELATÓRIO ESPECIAL – 1998 a 2001" em dezembro de 2001;
9. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2002", em agosto de 2002;
10. "RELATÓRIO ANUAL – 2002", em fevereiro de 2003;
11. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2003", em agosto de 2003;
12. "RELATÓRIO ANUAL – 2003", em fevereiro de 2004;
13. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2004", em agosto de 2004;
14. "RELATÓRIO ANUAL – 2004", em fevereiro de 2005;
15. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2005", em setembro de 2005;
16. "RELATÓRIO ANUAL – 2005 – em fevereiro de 2006";
17. "RELATÓRIO SEMESTRAL – janeiro a junho de 2006", em agosto de 2006;

CONTRATO DE GESTÃO CNPq/MCT – ABTLuS
Relatório Anual de 2006

Relatório Anual

2006

Março de 2007

Este relatório foi aprovado pelo Conselho de Administração da ABTLuS – Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron – em reunião ordinária realizada em 09 de março de 2007.

Correspondência:

Caixa Postal 6192 – CEP 13083-970 – Campinas – São Paulo

Telefone: (19) 3512-1010

<http://www.lnls.br>